

Синглет-триплетная модель магнетизма купратов

© А.С. Москвин, А.С. Овчинников

Уральский государственный университет,
620083 Екатеринбург, Россия

E-mail: alexandr.moskvin@usu.ru

(Поступила в Редакцию 3 ноября 1997 г.

В окончательной редакции 10 апреля 1998 г.)

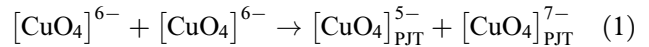
В рамках модели полярных синглет-триплетных ян-теллеровских центров предложена модель для описания спиновой подсистемы купратов. В этой модели спиновое упорядочение описывается двумя векторными параметрами порядка \mathbf{S} (полным спином кластера CuO_4) и \mathbf{V} (оператором изменения спиновой мультиплетности на кластере). В рамках модифицированного приближения среднего поля показано, что наряду с обычными коллинеарными структурами (анти)ферромагнитного типа, хотя и с нетривиальной температурной зависимостью параметров порядка, возможно образование неколлинеарной магнитной структуры, характеризующейся антиферромагнитным волновым вектором. Получены температурные зависимости параметров порядка и основных равновесных термодинамических характеристик — стигической восприимчивости и теплоемкости.

Проблема описания статических и динамических магнитных свойств купратов в последние годы считается центральной проблемой высокотемпературной сверхпроводимости. К настоящему времени нейтронографическими исследованиями твердо установлено, что в диэлектрической фазе спиновая статика и динамика таких купратов, как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, хорошо описывается гейзенберговским гамильтонианом со спином $s = \frac{1}{2}$ для CuO_2 -плоскости или двух плоскостей [1,2]. При описании же сверхпроводящих составов до сих пор определенные надежды связываются с $t - J$ -моделью и моделью почти антиферромагнитной Ферми-жидкости (nearly AFL), однако эти теории имеют ряд принципиальных трудностей в своем корректном микроскопическом обосновании. Серьезная конструктивная критика этих двух широко популяризуемых подходов, предпринятая недавно Андерсоном [3], вновь, по истечении более чем десяти лет со дня открытия ВТСП, поднимает фундаментальный вопрос о выборе адекватной микроскопической модели магнетизма купратов.

На наш взгляд, одной из наиболее плодотворных идей, которые могли бы составить основу микроскопического сценария ВТСП, является идея об особой роли эффекта Яна–Теллера, ян-теллеровских центров (поляронов), которая служила отправной точкой пионерских исследований Мюллера, завершившихся открытием ВТСП [4,5]. Эта идея на протяжении последних лет неоднократно обсуждалась и привлекалась для объяснения отдельных свойств купратов [6,7]. В работах [8–11] она оформлена в виде оригинальной модели синглет-триплетных псевдо-ян-теллеровских центров, рассчитанной на описание всего разнообразия свойств ВТСП. Далее в рамках этой модели мы рассмотрим описание спиновой подсистемы медных оксидов.

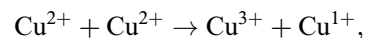
1. Модель полярных синглет-триплетных псевдо-ян-теллеровских центров

Модель полярных синглет-триплетных псевдо-ян-теллеровских (РJT) центров рассматривает медные оксиды на основе кластеров CuO_4 как системы, неустойчивые относительно реакции диспропорционирования



с образованием системы полярных (дырочных $[\text{CuO}_4]^{5-}$ или электронных $[\text{CuO}_4]^{7-}$ РJT-центров. Электронный и дырочный РJT-центры различаются двумя электронами, спаренными в полностью заполненной молекулярной орбитали CuO_4 -кластера и образующими локальный синглетный бозон. Новая фаза может быть представлена как система таких локальных синглетных бозонов, движущихся в решетке дырочных РJT-центров, с концентрацией бозонов N_B , близкой к 1/2. Ян-теллеровская структура полярных центров обеспечивает высокую стабильность диспропорционированной фазы, сосуществующей с исходной материнской антиферромагнитной матрицей для слабодопированных составов, с малой вероятностью обратного рекомбинированного процесса.

Низкий уровень порога реакции диспропорционирования ΔE_d является одним из уникальных свойств медных оксидов. Для слабоковалентных оксидов реакция (1) свелась бы к реакции



энергия порога для которой совпадает с корреляционной энергией внутриатомного электростатического отталкивания $U_d \sim 10 \text{ eV}$. В реальности для сильноковалент-

ных оксидов меди электронные конфигурации полярных центров $[\text{CuO}_4]^{5-}$ и $[\text{CuO}_4]^{7-}$ заметно отличаются от их простейших "ионных" аналогов Cu^{3+} и Cu^{1+} соответственно. Так, электронная плотность двух дырок в основном состоянии дырочного центра $[\text{CuO}_4]^{5-}$ может быть примерно одинаково распределена между медью и кислородом, что формально будет соответствовать ионному составу Cu^{2+} на меди. В результате величина энергии порога реакции диспропорционирования в оксидах меди приближается к энергии переноса электрона кислород–медь, величина которой в непроводящих оксидах меди составляет всего 1–2 eV.

Реакция диспропорционирования в системах типа 2–1–4, 1–2–3 и других стимулируется неизовалентным замещением и сопровождается образованием зародышей новой фазы, сосуществующих, в общем случае, со старой "материнской" антиферромагнитной фазой. Химическое или физическое разделение фаз играет принципиальную роль для объяснения многих особенностей поведения медных оксидов с неизовалентным замещением иши зарядовой неоднородностью.

Замечательным свойством основного состояния полярных центров $[\text{CuO}_4]^{5-}$ и $[\text{CuO}_4]^{7-}$ является наличие квазивырождения (близких уровней), когда дырка, допируемая в исходный "однодырочный" кластер $[\text{CuO}_4]^{6-}$ с образованием дырочного центра $[\text{CuO}_4]^{5-}$, может "сесть" в наполовину заполненную $\text{Cu}3d\text{--O}2p$ -гибридную b_{1g} -орбиталь с образованием синглета Жанга–Райса (b_{1g}^2) $^1A_{1g}$ или чисто кислородную молекулярную $\text{O}2p$ -орбиталь e_u -симметрии с образованием синглетного или триплетного терма ($b_{1g}e_u$) $^{1,3}E_u$ с близкой энергией.

Наличие квазивырождения с конкуренцией конфигураций b_{1g}^2 и $b_{1g}e_u$ и термов $^1A_{1g}$ и $^{1,3}E_u$ соответственно может привести к реализации условий для сильного псевдоэффекта Яна–Теллера с активными модами смещений для CuO_4 -кластера типа Q_{e_u} , $Q_{b_{1g}}$ и $Q_{b_{2g}}$ и образованием четырехъямного адиабатического потенциала двух типов симметрии E_uB_{1g} и E_uB_{2g} .

Необычные свойства термов $^1A_{1g}$, $^{1,3}E_u$, отличающихся четностью, спиновой и орбитальной мультиплетностью, обеспечивают формирование необычных свойств основного состояния дырочных центров $[\text{CuO}_4]^{5-}$ с активной ролью орбитальных, спиновых и локальных структурных (точнее вибронных) мод.

Дырочный РТТ-центр, с его высокой поляризуемостью, может стать центром эффективного локального спаривания с образованием локального синглетного бозона, при этом $[\text{CuO}_4]^{5-}_{\text{РТТ}}$ -центр с локальным бозоном существенно отличается от примитивного $[\text{CuO}_4]^{7-}$ -центра, представляющего собой невырожденную систему из полностью заполненных $\text{Cu}3d$ - и $\text{O}2p$ -оболочек.

Переход от дырочного к электронному РТТ-центру может в общем случае сопровождаться изменением затравочных локальных параметров, таких, например, как $A\text{--}E$ -расщепление $\Delta_{AE} = \varepsilon(^1E_u) - \varepsilon(^1A_{1g})$ или синглет-

триплетное расщепление $\Delta_{ST} = \varepsilon(^3E_u) - \varepsilon(^1E_u)$, а также сменной основной ян-теллеровской моды $E_uB_{1g} \leftrightarrow E_uB_{2g}$.

В целом необычные свойства купратов определяются CuO_4 -центрами в активных CuO_2 -плоскостях. Окружение этих плоскостей, включая апексный кислород, обеспечивает соответствующие условия для зародышеобразования и структуры новой фазы полярных РТТ-центров.

Не останавливаясь детально на проблеме экспериментального обоснования модели синглет-триплетных РТТ-центров, отметим недавние эксперименты по ЯКР-исследованию системы $\text{La}_2\text{Cu}_{0.5}\text{Li}_{0.5}\text{O}_4$, в которой ионы Li^{1+} образуют упорядоченную сверхрешетку, изолируя отдельные дырочные центры CuO_4^{5-} друг от друга, что позволило исследовать спиновую структуру кластера CuO_4 в состоянии с допированной дыркой [12]. При этом было экспериментально доказано существование наряду с основным спиновым синглетом Жанга–Райса низколежащего спинового триплета с энергией порядка ~ 130 meV, близкой по величине к константе эффективного обменного взаимодействия между медными спинами в недопированных и слабо допированных купратах.

Рассматриваемая модель, как и известная биполярная модель Александрова–Мотта, является одним из вариантов модели локальных бозонов Шафрота [13]. В отличие от биполярной модели, предполагающей достаточно сложную структуру локального бозона как связанной синглетной или триплетной пары малых поляронов и относительно простую "жесткую" решетку, модель РТТ-центров предполагает относительно простую структуру локального синглетного бозона типа пары электронов в заполненной молекулярной оболочке, но сложную РТТ-структуру решетки.

2. Синглет-триплетная модель магнетизма купратов

Чтобы максимально упростить описание спиновой подсистемы в фазе ян-теллеровских полярных центров, ограничимся рассмотрением синглетного и триплетного 1E_u , 3E_u термов для конфигурации $b_{1g}e_u$, пренебрегая орбитальным вырождением и учитывая изотропное спиновое обменное взаимодействие между b_{1g} и e_u дырками в соседних CuO_4 -центрах. Такой подход приводит к двухкомпонентному спиновому гамильтониану

$$\begin{aligned}
 H_{ST} = & \frac{1}{2} \sum_i I_{b_{1g}e_u}(ii) \mathbf{s}_{1i} \mathbf{s}_{2i} + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{b_{1g}b_{1g}}(ij) \mathbf{s}_{1i} \mathbf{s}_{1j} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{b_{1g}e_u}(ij) \mathbf{s}_{1i} \mathbf{s}_{2j} + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{e_ub_{1g}}(ij) \mathbf{s}_{2i} \mathbf{s}_{1j} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{e_ue_u}(ij) \mathbf{s}_{2i} \mathbf{s}_{2j}, \quad (2)
 \end{aligned}$$

где \mathbf{s}_{1i} , \mathbf{s}_{2i} — спины, локализованные на преимущественно медной b_{1g} и чисто кислородной e_u орбиталях

соответственно. Первое слагаемое в (2) описывает внутрицентричный dp -обмен, а оставшиеся — межцентровые dd -, dp -, pp -обменные взаимодействия.

Вводя суммарный спин i -го кластера $\mathbf{S}_i = \mathbf{s}_{1i} + \mathbf{s}_{2i}$ и оператор спиновой поляризации (синглет-триплетного смешивания)

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{s}_{1i} - \mathbf{s}_{2i}$$

с ненулевым матричным элементом типа $\langle 00|V_z|10\rangle$, можно представить (2) в виде

$$H_{ST} = \frac{\Delta_{ST}}{2} \sum_i \mathbf{S}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij}^{(1)} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij}^{(2)} \mathbf{S}_i \mathbf{V}_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij}^{(3)} \mathbf{V}_i \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij}^{(4)} \mathbf{V}_i \mathbf{V}_j. \quad (3)$$

Здесь введены новые обменные интегралы

$$I_{ij}^{(1)} = \frac{1}{4} \left\{ I_{b_{1g}b_{1g}}(ij) + I_{e_u e_u}(ij) + 2I_{b_{1g}e_u}(ij) \right\},$$

$$I_{ij}^{(2)} = I_{ij}^{(3)} = \frac{1}{4} \left\{ I_{b_{1g}b_{1g}}(ij) - I_{e_u e_u}(ij) \right\},$$

$$I_{ij}^{(4)} = \frac{1}{4} \left\{ I_{b_{1g}b_{1g}}(ij) + I_{e_u e_u}(ij) - 2I_{b_{1g}e_u}(ij) \right\}$$

и параметр синглет-триплетного расщепления $\Delta_{ST} = I_{b_{1g}e_u}(ii)$. Первое слагаемое в (3) явным образом учитывает внутрицентричный dp -обмен, соответствующий синглет-триплетному расщеплению на каждом кластере, второе описывает традиционный гайзенберговский обмен триплетов, приводящий к образованию спиновых волн. Оставшиеся слагаемые нетривиальны и соответствуют спин-поляризационному обмену с возможным образованием магнитных экситонов (волн спиновой мультиплетности) и их гибридизации со спиновыми волнами.

Численные значения и знаки обменных параметров $I^{(1,2,3,4)}$ определяются конкуренцией между $b_{1g} - b_{1g}$ -, $b_{1g} - e_u$ - и $e_u - e_u$ -обменными взаимодействиями, следует отметить лишь различные знаки $b_{1g} - e_u$ -вклада в $I^{(1)}$ и $I^{(4)}$ по сравнению с $b_{1g} - b_{1g}$ - и $e_u - e_u$ -вкладами в $I^{(2)} = I^{(3)}$.

В отличие от хорошо известных слабоковалентных и слабокоррелированных магнитных оксидов типа ферритов обменное взаимодействие двух ближайших соседних РТТ центров в сильно ковалентных купратах включает необычно большой ферромагнитный хундовский вклад (для разных орбиталей) или антиферромагнитные корреляционные вклады (для одинаковых орбиталей) в внутриаионный $O2p$ -обмен на общем ионе кислорода, кроме того, необходимо учитывать относительно большой ферромагнитный вклад за счет гайзенберговского $Cu3d-O2p$ -обмена. В целом детальный микроскопический анализ обменных взаимодействий в РТТ-центрах достаточно сложен, особенно в условиях их сравнимости с величиной синглет-триплетного расщепления $I \sim \Delta_{ST} \sim 0.1$ eV.

Проблема синглет-триплетного магнетизма обсуждалась достаточно давно и подробно в связи с описанием магнитного поведения редкоземельных магнетиков с некрамерсовскими ионами типа Pr^{3+} , Tb^{3+} , Tm^{3+} [14–16]. До недавнего времени существовало устойчивое мнение, что синглетный магнетизм характерен только для соединений с редкоземельными элементами. Однако в последние годы модель синглет-триплетного магнетизма стала разрабатываться и для оксидов группы железа, например для соединения La_2NiO_4 [17].

Гамильтониан (3) имеет симметрию группы $SO(4)$ [18]

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}S_k, \quad [S_i, V_j] = i\varepsilon_{ijk}V_k, \quad [V_i, V_j] = i\varepsilon_{ijk}S_k, \quad (4)$$

алгебра которой имеет два инвариантных оператора (операторы Казимира)

$$C_1^{SO(4)} = \mathbf{S}^2 + \mathbf{V}^2 = 3I, \quad C_2^{SO(4)} = \mathbf{S} \mathbf{V} = 0. \quad (5)$$

Эти соотношения накладывают кинематическое ограничение на величины S и V параметров порядка и непосредственно вытекают из спиновой алгебры операторов S и V .

Рассмотрим гамильтониан (3) в рамках модифицированного двухподрешеточного приближения среднего поля, учитывающего взаимодействие ближайших соседей (для обозначения подрешеток введем дополнительный индекс $\gamma = A, B$). Гамильтониан (3) может быть представлен в виде

$$H_{MFA} = \frac{\Delta}{2} \sum_{i\gamma} \mathbf{S}_{i\gamma}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\gamma} h_{s_{i\alpha\gamma}} \langle S_{i\alpha} \rangle_{\gamma} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\gamma} h_{v_{i\alpha\gamma}} \langle V_{i\alpha} \rangle_{\gamma} + \sum_{i\alpha\gamma} h_{s_{i\alpha\gamma}} S_{i\alpha\gamma} + \sum_{i\alpha\gamma} h_{v_{i\alpha\gamma}} V_{i\alpha\gamma} \quad (6)$$

с молекулярными полями

$$h_{s_{i\alpha\gamma}} = \sum_{i,\gamma'} \left(I_{ij}^{(1)} \langle S_{j\alpha} \rangle_{\gamma'} + I_{ij}^{(2)} \langle V_{j\alpha} \rangle_{\gamma'} \right), \quad (7)$$

$$h_{v_{i\alpha\gamma}} = \sum_{i,\gamma'} \left(I_{ij}^{(2)} \langle S_{j\alpha} \rangle_{\gamma'} + I_{ij}^{(4)} \langle V_{j\alpha} \rangle_{\gamma'} \right), \quad (8)$$

где $\alpha = x, y, z$. Отметим, что стандартное рассмотрение гамильтонианов (2), (3) в приближении среднего поля отличается в учете первого слагаемого, описывающего внутрицентричное обменное взаимодействие. В отличие от обычного подхода SM_S -представление полного спина, использованное в (3), обеспечивает точный учет внутрицентричного обменного взаимодействия. В стандартном приближении молекулярного поля для гамильтониана (3) средние $\langle \mathbf{S} \rangle$ и $\langle \mathbf{V} \rangle$ (часто обозначаемые как \mathbf{M} и \mathbf{L}) соответствуют векторам ферро- и антиферромагнетизма для РТТ-центра с кинематическими соотношениями

$$\langle \mathbf{S} \rangle^2 + \langle \mathbf{V} \rangle^2 = 4s_1^2 = 4s_2^2 = 1, \quad \langle \mathbf{S} \rangle \langle \mathbf{V} \rangle = 0$$

вместо операторного соотношения (5), которое для соответствующих средних эквивалентно

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle + \langle \mathbf{V}^2 \rangle = 4s_1(s_1 + 1) = 3, \quad \langle \mathbf{S} \mathbf{V} \rangle = 0.$$

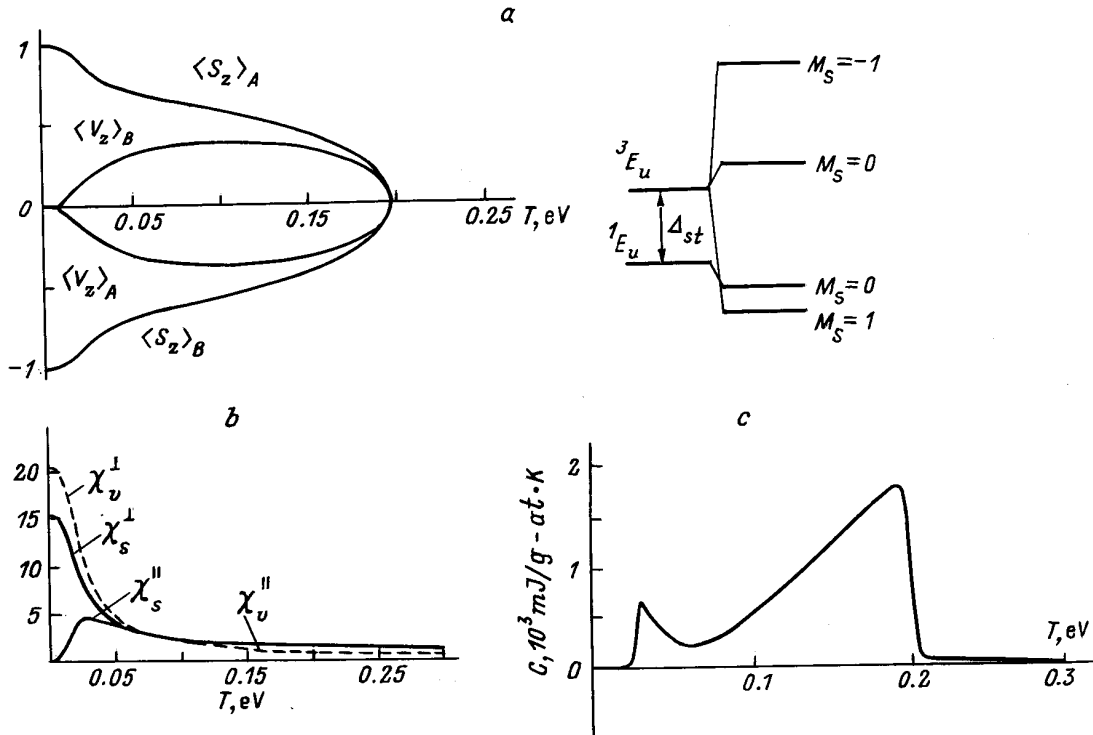


Рис. 1. Температурная зависимость параметров порядка (а), продольной и поперечной магнитных восприимчивостей χ_s (сплошные линии) и χ_v (штриховые линии) (b), теплоемкости (c) для SS -фазы ($\Delta = 0.1 \text{ eV}$, $zI^{(1)} = 0.3 \text{ eV}$, $zI^{(2)} = -0.2 \text{ eV}$, $zI^{(4)} = 0.1 \text{ eV}$). На вставке показана соответствующая картина расщепления спиновых уровней ($T = 0$).

Таким образом, синглет-триплетная модель в рамках модифицированного приближения среднего поля позволяет более точно учесть квантовые эффекты, существенные для малого спина $s_{1,2} = 1/2$.

Появление двух векторных параметров порядка и наличие кинематического соотношения (5) вносят существенные изменения в анализ возможного спинового упорядочения. В общем случае мы имеем дело с конкуренцией обменных взаимодействий SS , VV , SV типа, что обеспечивает появление наряду с простыми коллинеарными спиновыми конфигурациями двухподрешеточных многопараметрических $|\langle \mathbf{S} \rangle|, |\langle \mathbf{V} \rangle|$, $\Theta_{AA} = \Theta_{BB}$, Θ_{AB} угловых спиновых конфигураций (здесь и далее $\Theta_{AA, BB}$ — угол между векторами \mathbf{S} и \mathbf{V} выделенного узла подрешетки $A(B)$, Θ_{AB} — угол между \mathbf{S}_A и \mathbf{S}_B).

3. Коллинеарные фазы

Относительно простые коллинеарные спиновые конфигурации, являющиеся прямыми аналогами (анти)ферромагнитного упорядочения, возможны при следующих соотношениях знаков обменных параметров: 1) $I^{(1,2,3,4)} < 0$, $\Theta_{AA} = \Theta_{BB} = \Theta_{AB} = 0$; 2) $I^{(1,4)} > 0$, $I^{(2,3)} < 0$, $\Theta_{AA} = \Theta_{BB} = \Theta_{AB} = \pi$; 3) $I^{(1,2,3,4)} > 0$, $\Theta_{AA} = \Theta_{BB} = 0$, $\Theta_{AB} = \pi$; 4) $I^{(1,4)} < 0$, $I^{(2,3)} > 0$, $\Theta_{AA} = \Theta_{BB} = \pi$, $\Theta_{AB} = 0$. В приближении взаимодействия ближайших соседей свободная энергия коллине-

арных спиновых структур в расчете на один центр

$$\begin{aligned} \tilde{F} = \frac{F}{N} = & -\frac{1}{4} \sum_{\gamma=A,B} \left(h_{sz\gamma} \langle S_z \rangle_{\gamma} + h_{vz\gamma} \langle V_z \rangle_{\gamma} \right) \\ & + \frac{\Delta}{2} - \frac{1}{2\beta} \sum_{\gamma=A,B} \ln \left\{ 2 \left(\text{ch} \left(\frac{\beta}{2} \alpha_{\gamma} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \exp \left(-\beta \frac{\Delta}{2} \right) \text{ch}(\beta h_{sz\gamma}) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\alpha_{\gamma} = \{\Delta^2 + 4h_{vz\gamma}^2\}^{1/2}$, $\beta = \frac{1}{T}$ — обратная температура.

Самосогласованные уравнения для параметров порядка, минимизирующих \tilde{F} , имеют вид

$$\langle S_z \rangle_{\gamma} = -\frac{\exp(-\beta \frac{\Delta}{2}) \text{sh}(\beta h_{sz\gamma})}{\text{ch}(\frac{\beta}{2} \alpha_{\gamma}) + \exp(-\beta \frac{\Delta}{2}) \text{ch}(\beta h_{sz\gamma})}, \quad (10)$$

$$\langle V_z \rangle_{\gamma} = -\frac{2 \frac{h_{vz\gamma}}{\alpha_{\gamma}} \text{sh}(\frac{\beta}{2} \alpha_{\gamma})}{\text{ch}(\frac{\beta}{2} \alpha_{\gamma}) + \exp(-\beta \frac{\Delta}{2}) \text{ch}(\beta h_{sz\gamma})}. \quad (11)$$

Уравнения среднего поля (10), (11) могут быть использованы для нахождения возможных коллинеарных спиновых конфигураций и условий их существования.

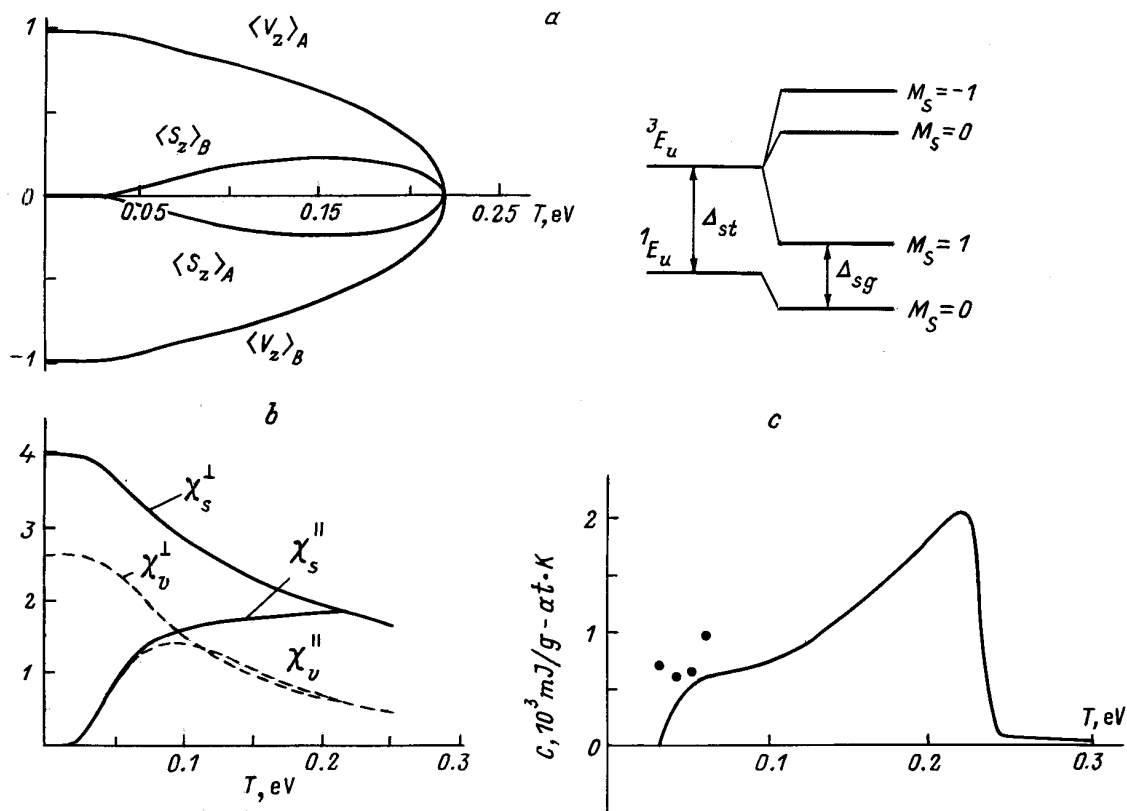


Рис. 2. Температурная зависимость параметров порядка (а), продольной и поперечной магнитных восприимчивостей χ_s (сплошные линии) и χ_v (штриховые линии) (b), теплоемкости (c) для VV -фазы ($\Delta = 0.1$ eV, $zI^{(1)} = 0.1$ eV, $zI^{(2)} = -0.2$ eV, $zI^{(4)} = 0.3$ eV). На вставке показана соответствующая картина расщепления спиновых уровней ($T = 0$) и эффективная спиновая щель. Темными кружками отмечен электронный вклад в теплоемкость по данным работы [19].

Основные результаты анализа гамильтониана (6) в приближении среднего поля при $T = 0$ для коллинеарных спиновых конфигураций приведены в таблице. Для чисто синглетной немагнитной фазы каждый РТТ-центр характеризуется синглетным основным состоянием $|00\rangle$. Для триплетной SS спиновой конфигурации одно из чисто триплетных состояний $|11\rangle$ или $|1-1\rangle$ имеет минимальную энергию в обеих подрешетках A, B (рис. 1). Основное состояние фазы РТТ-центров на подрешетках A, B для VV -фазы является квантовой смесью состояний $|00\rangle$ и $|10\rangle$ (рис. 2), что соответствует упорядочению спиновой плотности. Фазовая диаграмма основного состояния синглет-триплетного магнетика (рис. 3) для случая $I^{(2)} = 0$, исключающего появление неколлинеарной спиновой конфигурации, дает качественную картину реального магнитного поведения синглет-триплетной системы. Переходы между VV - и SS -фазами, как и переходы между синглетной и триплетными фазами, соответствуют переходам первого рода. Переходы между синглетной фазой и фазами смешанного спина VV являются переходами второго рода.

Чистые SS - и VV -конфигурации реализуются только при $T = 0$, тогда как при конечных значениях T мы имеем дело с отличными от нуля значениями как $\langle S_z \rangle$, так и $\langle V_z \rangle$, т. е. со смешиванием фаз.

Температура Кюри (Нееля) T_c , определяемая как температура, при которой все параметры одновременно обращаются в нуль, получается разложением системы (10), (11) по соответствующим малым параметрам по

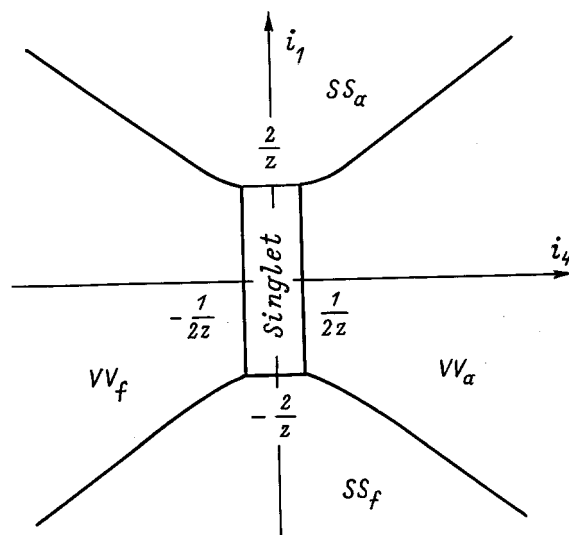


Рис. 3. Фазовая диаграмма коллинеарных фаз синглет-триплетного магнетика ($I^{(2)} = 0$, $i_1 = I^{(1)}/\Delta$, $i_4 = I^{(4)}/\Delta$).

Типы возможных коллинеарных структур при $T = 0$ ($i_1 = \frac{I^{(1)}}{\Delta}$, $i_2 = \frac{I^{(2)}}{\Delta}$, $i_4 = \frac{I^{(4)}}{\Delta}$)

Спиновая конфигурация	Условия стабильности	Свободная энергия; $\varepsilon = \frac{E}{\Delta}$
Синглет $\langle S_z \rangle_A = \langle S_z \rangle_B = 0$, $\langle V_z \rangle_A = \langle V_z \rangle_B = 0$	$ i_4 < \frac{1}{2z}$	$\varepsilon = 0$
Ферромагнитная VV -фаза $\langle S_z \rangle_A = \langle S_z \rangle_B = 0$, $\langle V_z \rangle_A = \langle V_z \rangle_B = \pm \eta$ $\eta = \left(1 - \frac{1}{4z^2 i_4^2}\right)^{1/2}$	$i_4 < 0$, $ i_2 < i_4 \frac{2zi_4 - 1}{\sqrt{4z^2 i_4^2 - 1}}$	$\varepsilon = -\frac{1}{2}zi_4\eta^2 + \frac{1}{2} + zi_4$
Антиферромагнитная VV -фаза $\langle S_z \rangle_A = \langle S_z \rangle_B = 0$, $\langle V_z \rangle_A = -\langle V_z \rangle_B = \pm \eta$ $\eta = \left(1 - \frac{1}{4z^2 i_4^2}\right)^{1/2}$	$i_4 > 0$, $ i_2 < i_4 \frac{2zi_4 + 1}{\sqrt{4z^2 i_4^2 - 1}}$	$\varepsilon = \frac{1}{2}zi_4\eta^2 + \frac{1}{2} - zi_4$
Триплетная ферромагнитная SS -фаза $\langle S_z \rangle_A = \langle S_z \rangle_B = \pm 1$, $\langle V_z \rangle_A = \langle V_z \rangle_B = 0$	$i_1 < -\frac{1}{2z} - \frac{1}{2z}\sqrt{1 + 4z^2 i_2^2}$	$\varepsilon = 1 + \frac{z}{2}i_1$
Триплетная антиферромагнитная SS -фаза $\langle S_z \rangle_A = -\langle S_z \rangle_B = \pm 1$, $\langle V_z \rangle_A = \langle V_z \rangle_B = 0$	$i_1 > \frac{1}{2z} + \frac{1}{2z}\sqrt{1 + 4z^2 i_2^2}$	$\varepsilon = 1 - \frac{z}{2}i_1$

рядка, что приводит к паре нелинейных уравнений

$$2 \exp\left(\beta \frac{\Delta}{2}\right) \operatorname{sh}\left(\beta \frac{\Delta}{2}\right) \left\{ \left(2zI^{(2)}\right)^2 - 4z^2 I^{(1)} I^{(4)} \right\} = \left(3 + \exp(\beta \Delta)\right) \left\{ \frac{\Delta}{\beta} \left(3 + \exp(\beta \Delta)\right) \pm 2zI^{(1)} \Delta \pm 4 \frac{zI^{(4)}}{\beta} \exp\left(\beta \frac{\Delta}{2}\right) \operatorname{sh}\left(\beta \frac{\Delta}{2}\right) \right\}, \quad (12)$$

решение которой дает $T_{1,2}$, тогда $T_c = \max\{T_1, T_2\}$ (z — число ближайших соседей).

Наличие двух спиновых параметров порядка приводит к двум типам спиновых восприимчивостей: обычной $\chi_s \sim \partial \langle \mathbf{S} \rangle / \partial \mathbf{h}$ и новой спин-поляризационной восприимчивости $\chi_v \sim \partial \langle \mathbf{V} \rangle / \partial \mathbf{h}$ с разным температурным поведением (рис. 1, *b*, 2, *b*).

Отметим, что учет синглет-триплетного смешивания или V -слагаемых приводит к подавлению магнетизма S -типа и особому "почти парамагнитному" поведению системы. Это проявляется как в поведении параметра порядка $\langle S_z \rangle$, так и в тенденции к совпадению продольной и поперечной спиновых восприимчивостей (рис. 1, *b*). Парциальные спиновые поляризации на меди и кислороде могут иметь необычное температурное поведение для рассмотренных фаз из-за антиферромагнитных обменных взаимодействий SS - и VV -типа. Так, в SS -фазе для случая,

представленного на рис. 1, *a*, с увеличением температуры наступает кроссовер от внутрицентрового ферромагнитного упорядочения ($\langle V_z \rangle \sin 0$) к состоянию с интенсивным квантовым подавлением спин-поляризации медной подсистемы ($\langle V_z \rangle \sim -\langle S_z \rangle$). Для VV -фазы в ситуации, представленной на рис. 2, *a*, подобное подавление происходит начиная с антиферромагнитного внутрицентрового упорядочения. Обе фазы обнаруживают различное поведение медной $\chi_d = \left(\frac{1}{2}\right)(\chi_s + \chi_v)$ и кислородной $\chi_p = \left(\frac{1}{2}\right)(\chi_s - \chi_v)$ восприимчивостей. Близкие значения и одинаковые знаки χ_s и χ_v в SS -фазе приводят к большой величине первой и почти полному исчезновению последней.

На рис. 1, *c*, 2, *c* приведены результаты расчета спиновой теплоемкости для коллинеарных фаз, причем для удобства все данные приведены в пересчете для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Отметим характерное спин-целое поведение теплоемкости, а также ее численные значения, которые в интервале $300 < T < 700$ К вполне сравнимы с оцененным в работе [19] электронным вкладом, приписанным авторами фермиевской электронной подсистеме. Эти результаты показывают необходимость более детального анализа спиновой теплоемкости медных оксидов для корректного разделения различных вкладов в экспериментально наблюдаемую величину теплоемкости и выделения собственного вклада, анализ которого широко используется для выводов о применимости того или иного механизма ВТСП.

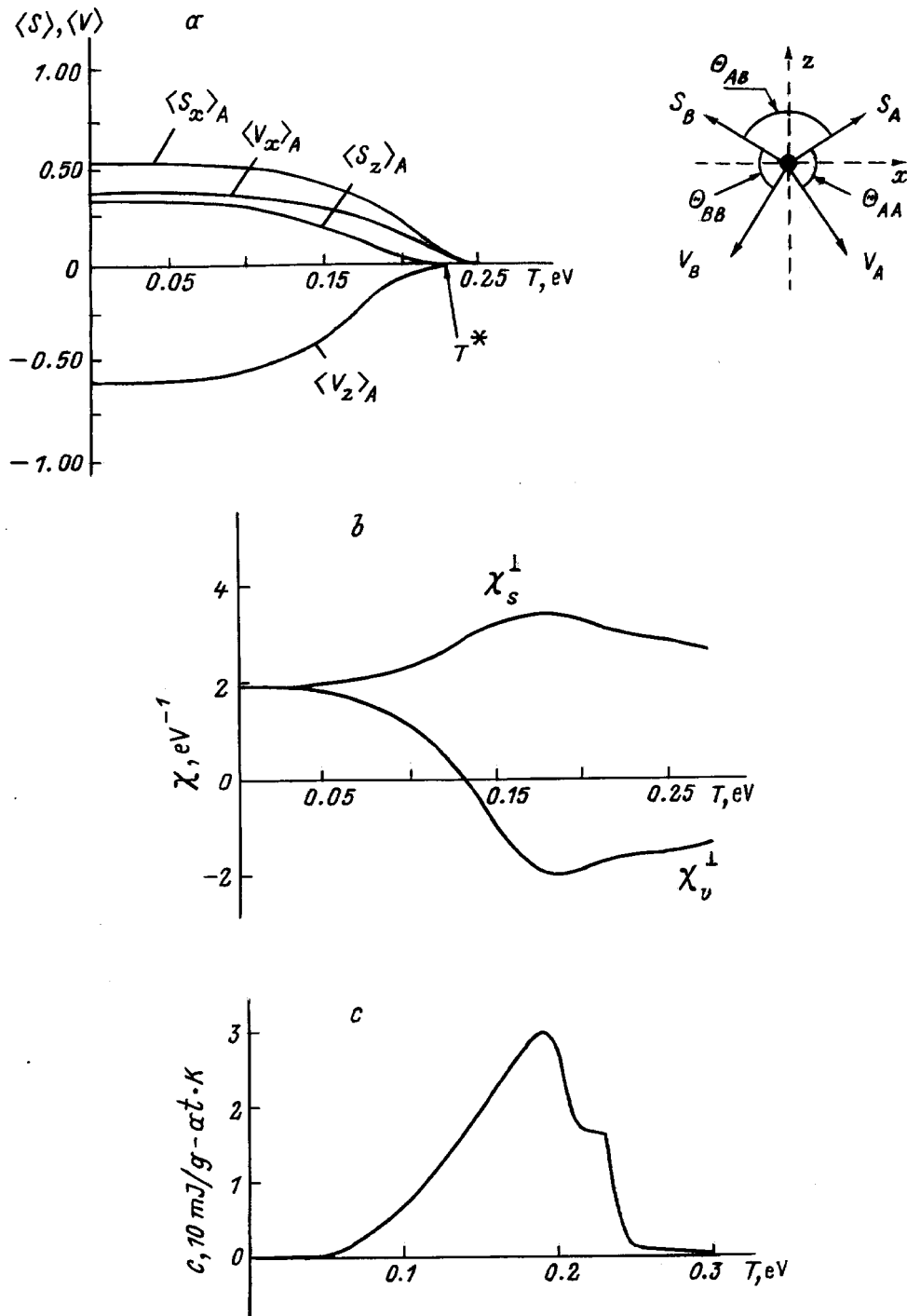


Рис. 4. Температурная зависимость параметров порядка (а) (приведены значения для подрешетки А), поперечных магнитных восприимчивостей $\chi_{s,v}^\perp$ (б), теплоемкости (с) для неколлинеарной фазы ($\Delta = 0.1$ eV, $zI^{(1)} = 0.2$ eV, $zI^{(2)} = 0.3$ eV, $zI^{(4)} = -0.1$ eV).

4. Неколлинеарные фазы

Принципиальной особенностью неколлинеарных спиновых конфигураций в рассматриваемой модели является их двухподрешеточный характер с комбинированным ферро-антиферромагнитным упорядочением компонент векторных параметров порядка $\langle S \rangle$ и $\langle V \rangle$ и, в об-

щем случае, характерным волновым вектором структуры $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi, \pi)$, что отличает рассматриваемые структуры от неколлинеарных несоизмеримых структур типа геликоидальных.

Аналитическое рассмотрение угловых фаз громоздко и вряд ли представляется целесообразным, поэтому мы обсудим результаты численного решения. Температурное

поведение различных компонент параметров порядка, восприимчивостей и магнитной теплоемкости для одного из вариантов неколлинеарной фазы представлено на рис. 4. В отличие от коллинеарных фаз в рассматриваемой ситуации оба параметра порядка $\langle \mathbf{S} \rangle$ и $\langle \mathbf{V} \rangle$ являются одновременно ненулевыми при $T = 0$, хотя соотношение ортогональности (5) выполняется для каждого узла. С ростом температуры наблюдается тенденция к коллинеарному упорядочению: $\langle \mathbf{S} \rangle_A \parallel \langle \mathbf{S} \rangle_B$ и $\langle \mathbf{V} \rangle_A \parallel \langle \mathbf{V} \rangle_B$, так что начиная с некоторой температуры T^* система практически переходит в коллинеарную фазу.

Для неколлинеарной фазы исчезает четкая разница между продольной и поперечной спиновыми восприимчивостями. На рис. 4*b* представлена температурная зависимость поперечных (в обозначениях рис. 4, *a* приложенное поле $\mathbf{H} \parallel Oz$ перпендикулярно вектору антиферромагнетизма в его обычном смысле) восприимчивостей χ_s^\perp и χ_v^\perp . Обратим внимание на аномальное температурное поведение спин-поляризационной восприимчивости χ_v^\perp . Так, для случая, представленного на рис. 4, *b*, при естественном положительном знаке χ_s^\perp восприимчивость χ_v^\perp меняет знак на отрицательный при $T \sim 0.13$ eV.

Появление многопараметрических угловых спиновых конфигураций вместо "жестких" коллинеарных (анти)ферромагнитных структур существенно расширяет возможности спиновой подсистемы купратов в оптимизации полной энергии, особенно в условиях сильной неоднородности внутрицентровых и межцентровых обменных параметров. Образующиеся магнитные структуры, даже в их статическом варианте, будут, скорее всего, напоминать квазидвумерные спинстекольные системы без четко выраженного дальнего порядка, но с существованием четко выраженных спиновых флуктуаций ферро- и антиферротипа. Магнитные структуры будут пинниговаться на центрах неоднородности с корреляционной длиной, ограничиваемой либо эффективным размером центра неоднородности, либо расстоянием между такими центрами. Отметим, что многочисленные проявления ферромагнитных флуктуаций [20,21] в диэлектрических и сверхпроводящих составах допированных купратов явно указывают на флуктуации неколлинеарных фаз.

В заключение отметим, что нами предложена синглет-триплетная модель для описания спиновой подсистемы купратов, в рамках которой проведен расчет основных характеристик системы в модифицированном варианте приближения молекулярного поля. Дальнейшее развитие рассмотренной модели предполагает учет квазидвумерной структуры купратов и сильно развитых флуктуаций внутрицентровых и межцентровых обменных параметров. В целом предложенная модель представляет собой надежную основу для разработки различных вариантов феноменологического описания спиновой статистики и динамики купратов.

Список литературы

- [1] S.M. Hayden, G. Aeppli, H.A. Mook, T.G. Perring, T.E. Mason, S.-W. Cheong, Z. Fisk. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 8, 1344 (1996).
- [2] P. Bourges, L.P. Regnault, Y. Sidis, C. Vettier. *Phys. Rev.* **B53**, 2, 876 (1996).
- [3] P.W. Anderson. *Adv. Phys.* **46**, 1, 1 (1997).
- [4] J.G. Bednorz, K.A. Muller. *Z. Phys.* **B64**, 2, 189 (1986).
- [5] K.A. Muller. *Materials and Mechanisms of Superconductivity High-Temperature Superconductors. 5th Int. Conf. M2S-HTSC-V Beijing, China (Feb. 28–Mar. 4, 1997). Abstract Book. P. 1.*
- [6] R. Englman, B. Halperin, M. Weger. *Physica* **C169**, 3–4, 314 (1990).
- [7] M. Georgiev, M. Borisov. *Phys. Rev.* **B39**, 16A, 11 624 (1989).
- [8] А.С. Москвин. *Письма в ЖЭТФ* **58**, 5, 342 (1993).
- [9] А.С. Москвин, Н.Н. Лошкарева, Ю.П. Сухоруков, М.А. Сидоров, А.А. Самохвалов. *ЖЭТФ* **105**, 4, 967 (1994).
- [10] A.S. Moskvin. *Physica* **C282–287**, 1807 (1997).
- [11] А.С. Москвин, А.С. Овчинников, О.С. Ковалев. *ФТТ* **39**, 11, 1948 (1997).
- [12] Y. Yoshinari, P.C. Hammel, J.A. Martindale, E. Moshopoulou, J.D. Thompson, J.L. Sarrao, Z. Fisk. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 10, 2069 (1996).
- [13] M.R. Schafroth. *Phys. Rev.* **100**, 2, 463 (1955).
- [14] R. Birgeneau, J. Als-Nielsen, E. Bucher. *Phys. Rev.* **B6**, 7, 2724 (1972).
- [15] Y. Kitano, G. Trammel. *Phys. Rev. Lett.* **16**, 5, 572 (1966).
- [16] Y.Y. Hsieh, M. Blume. *Phys. Rev.* **B6**, 7, 2684 (1972).
- [17] A.M. Oles, L.F. Feiner, J. Zaanen. *Abstracts of ICM-94, Warsaw (22–26 August 1994). P. 257.*
- [18] А. Боум. *Квантовая механика: основы и приложения. Мир, М. (1990). 720 с.*
- [19] M.E. Reeves, D.A. Ditmars, S.A. Wolf, T.A. Vanderah, V.Z. Kresin. *Phys. Rev.* **B47**, 10, 6065 (1993).
- [20] P. Wachter, B. Blucher, R. Pittini. *Phys. Rev.* **B49**, 18, 13 164 (1994).
- [21] Е.Л. Вавилова, Н.Н. Гарифьянов. *Письма в ЖЭТФ* **66**, 7, 470 (1997).