О взаимосвязи магнитных восприимчивостей локализованных и коллективизированных электронов в дырочных ВТСП

М. В. Еремин[1], *А. А. Алеев*, *И. М. Еремин*[2]*

Физический факультет, Казанский государственный университет, 420008 Казань, Россия

* *Max-Plank Institute fur Physik komplexer Systeme, Dresden, D-01187, Germany*

Поступила в редакцию 10 июля 2006 г.

В рамках модели синглетно-коррелированного движения дырок по позициям кислорода в слоях CuO_2 выведена формула для динамической спиновой восприимчивости, учитывающая сильную взаимосвязь намагниченностей спинов коллективизированных дырок и локализованных моментов на позициях меди. Рассчитанное поведение мнимой части восприимчивости как функции частоты и волнового вектора согласуется с имеющимися экспериментальными данными по неупругому рассеянию нейтронов. Предложен график дисперсии коллективных спиновых мод по всей зоне Бриллюэна.

PACS: 71.27.+a, 74.72.–h

Имеются веские основания считать, что магнетизм ВТСП на основе слоистых купратов является двойственным [1]. При слабом допировании это преимущественно магнетики с локализованными спинами на ядрах меди, а в передопированной области фазовой диаграммы их температурный ход восприимчивости напоминает поведение паулиевских парамагнетиков. Двойственный характер магнетизма соединений типа $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ особенно ярко проявился в недавних экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов [2 – 5]. В области волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ обнаружены два, взаимоисключающих с точки зрения теории простых металлов и диэлектриков, контура ("моды") максимумов в мнимой части восприимчивости. Мода с дугообразной дисперсией, наблюдаемая при $T < T_C$, для своего объяснения требует привлечения модели коллективизированных электронов и хорошо воспроизводится по формуле приближения случайных фаз (RPA) [6 – 8]. Мода же с U-образной дисперсией, наиболее четко наблюдающаяся в нормальной фазе, не объясняется в RPA. Для ее объяснения лучше подходит модель локализованных магнитных моментов на позициях меди, при этом, однако, возникает проблема описания сверхпроводящей фазы. В данной работе мы предлагаем универсальную формулу для динамической спиновой восприимчивости слоистых купратов, позволяющую одновременно описать обе указанные особенности в рассеянии нейтронов дырочными ВТСП.

Формула выведена методом функций Грина на основе гамильтониана

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \psi_i^{pd,\sigma} \psi_j^{\sigma,pd} + \frac{1}{2} \sum_{il} J_{il} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_l - \frac{n_i n_l}{4} \right) + + \frac{1}{2} \sum_{il} G_{il} \delta_i \delta_l. \quad (1)$$

Здесь $\psi_i^{pd,\sigma} (\psi_j^{\sigma,pd})$ – операторы рождения (уничтожения) композитных квазичастиц в зоне проводимости дырочно допированных ВТСП. Символ pd соответствует синглетным образованиям из дырок меди и кислорода [9 – 11]. Второе слагаемое описывает суперобменное взаимодействие спинов, последнее слагаемое учитывает взаимодействие типа плотность – плотность, $\delta_i = \psi_i^{pd,pd}$ – оператор числа дырок в расчете на одну элементарную ячейку. Полученное нами выражение для динамической восприимчивости имеет вид

$$\chi^{+,-}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{F(\omega, \mathbf{q}) + L_q b\,(\omega, \mathbf{q})}{D(\omega, \mathbf{q}) + \left(\Lambda_q^2 - \omega^2\right) b\,(\omega, \mathbf{q})}, \quad (2)$$

где

$$F(\omega, \mathbf{q}) = \chi(\omega, \mathbf{q}) - \chi_t\,(\omega, \mathbf{q})\, b\,(\omega, \mathbf{q}) . \quad (3)$$

Функция $\chi\,(\omega, \mathbf{q})$ с точностью до множителя совпадает со спиновой восприимчивостью в рамках теории БКШ, которую для дальнейшего удобно записать в виде

$$\chi(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{k,\,q} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} S_{xx} \frac{n_p - n_k}{\omega + E_k - E_p} + + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} S_{yy} \frac{n_k - n_p}{\omega - E_k + E_p} + + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} S_{yx}^{(-)} \frac{n_p + n_k - P}{\omega - E_k - E_p} +$$

[1]e-mail: Mikhail.Eremin@ksu.ru

[2]Ilya Eremin.

$$+\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} S^{(+)}_{xy}\frac{P-n_p-n_k}{\omega+E_k+E_p}, \qquad (4)$$

где $n_k = \langle \alpha_k^{pd,\sigma}\alpha_k^{\sigma,pd}\rangle = Pf_k$ – числа заполнения, факторы когерентности $S_{xx} = x_kx_p + z_kz_p$, $S_{yy} = y_ky_p + z_kz_p$, $S^{(-)}_{yx} = y_kx_p - z_kz_p$, $S^{(+)}_{xy} = x_ky_p - z_kz_p$ записываются через

$$x_k = u_k^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_k-\mu}{E_k}\right),$$

$$y_k = v_k^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_k-\mu}{E_k}\right), \quad z_k = u_kv_k = \frac{\Delta_k}{2E_k},$$

f_k – обычные ферми-функции, $E_k=\sqrt{(\epsilon_k-\mu)^2+|\Delta_k|^2}$ – энергии боголюбовских квазичастиц, P – среднее значение антикоммутатора операторов рождения и уничтожения композитных квазичастиц, $\mathbf{p}=\mathbf{k}+\mathbf{q}$, Δ_k – параметр сверхпроводящей щели, а закон дисперсии задается в виде $\epsilon_k = Pt_k - \mu$, где $t_k = 2t_1(\cos(k_xa)+\cos(k_ya))+4t_2\cos(k_xa)\cos(k_ya)$. Второе слагаемое в (3) – поправка к функции восприимчивости коллективизированных электронов, связанная с учетом сильных электронных корреляций. Входящие функции таковы:

$$\chi_t(\omega,\mathbf{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}(t_{k+q}-t_k)\chi_{Ekq}, \qquad (5)$$

$$\eta_t(\omega,\mathbf{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}(t_{k+q}-t_k)\left(J_q\chi_{Ekq}-\Pi_{Ekq}\right), \qquad (6)$$

$$\zeta_t(\omega,\mathbf{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}(t_{k+q}-t_k)\zeta_{Ekq}, \qquad (7)$$

где парциальные функции, стоящие под знаком суммы, имеют вид

$$\begin{aligned}\chi_{Ekq} = {} & S_{xx}\frac{(E_p-E_k)(n_p-n_k)}{\omega+E_k-E_p} + \\ & + S_{yy}\frac{(E_k-E_p)(n_k-n_p)}{\omega-E_k+E_p} + \\ & + S^{(-)}_{yx}\frac{(E_p+E_k)(n_p+n_k-P)}{\omega-E_k-E_p} - \\ & - S^{(+)}_{xy}\frac{(E_p+E_k)(P-n_p-n_k)}{\omega+E_k+E_p},\end{aligned} \qquad (8)$$

$$\begin{aligned}\Pi_{Ekq} = {} & S_{xx}\frac{(E_p-E_k)(t_pn_p-t_kn_k)}{\omega+E_k-E_p} + \\ & + S_{yy}\frac{(E_k-E_p)[t_p(P-n_p)-t_k(P-n_k)]}{\omega-E_k+E_p} + \\ & + S^{(-)}_{yx}\frac{(E_p+E_k)[t_pn_p+t_k(P-n_k)]}{\omega-E_k-E_p} - \\ & - S^{(+)}_{xy}\frac{(E_p+E_k)[t_p(P-n_p)-t_kn_k)]}{\omega+E_k+E_p},\end{aligned} \qquad (9)$$

$$\begin{aligned}\zeta_{Ekq} = {} & S_{xx}(E_p-E_k)\frac{P}{\omega+E_k-E_p} + \\ & + S_{yy}(E_k-E_p)\frac{P}{\omega-E_k+E_p} + \\ & + S^{(-)}_{yx}(E_p+E_k)\frac{P}{\omega-E_k-E_p} - \\ & - S^{(+)}_{xy}(E_p+E_k)\frac{P}{\omega+E_k+E_p},\end{aligned} \qquad (10)$$

Функция

$$D(\omega,\mathbf{q}) = \eta(\omega,\mathbf{q}) - \eta_t(\omega,\mathbf{q})b(\omega,\mathbf{q}) \qquad (11)$$

выражается через характеристики коллективизированных электронов и может быть сопоставлена со знаменателем спиновой восприимчивости в приближении RPA. Выражение для $\eta(\omega,\mathbf{q})$ содержит два члена:

$$\eta(\omega,\mathbf{q}) = J_q\chi(\omega,\mathbf{q}) - \Pi(\omega,\mathbf{q}), \qquad (12)$$

где $J_q = J_1(\cos(q_xa)+\cos(q_ya))$. Первый из них известен в RPA, происхождение второго члена в (12) связано с особенностями коммутационных соотношений композитных квазичастиц. Коммутационные соотношения в данной модели зависят от намагниченности [10,11]. Формулы для функций $\Pi(\omega,\mathbf{q})$ и $\zeta(\omega,\mathbf{q})$ имеют вид

$$\begin{aligned}\Pi(\omega,\mathbf{q}) = {} & \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\Pi_{k,q} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S_{xx}\frac{t_pn_p-t_kn_k}{\omega+E_k-E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S_{yy}\frac{t_p(P-n_p)-t_k(P-n_k)}{\omega-E_k+E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S^{(-)}_{yx}\frac{t_pn_p-t_k(P-n_k)}{\omega-E_k-E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S^{(+)}_{xy}\frac{t_p(P-n_p)-t_kn_k}{\omega+E_k+E_{k+q}},\end{aligned} \qquad (13)$$

$$\begin{aligned}\zeta(\omega,\mathbf{q}) = {} & \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\zeta_{k,q} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S_{xx}\frac{P}{\omega+E_k-E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S_{yy}\frac{P}{\omega-E_k+E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S^{(-)}_{yx}\frac{P}{\omega-E_k-E_p} + \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}S^{(+)}_{xy}\frac{P}{\omega+E_k+E_p}.\end{aligned} \qquad (14)$$

Такие функции для описания нормальной фазы впервые были введены в работах [12,13]. Фактор $b(\omega,\mathbf{q}) = \zeta(\omega,\mathbf{q})/\zeta_t(\omega,\mathbf{q})$, как видно из (7), обратно пропорционален затравочной ширине зоны ($\cong 8t_1$) и, таким образом, роль компоненты намагниченности локализованных моментов в (2) подавляется тем сильнее, чем больше ширина зоны проводимости.

Величина Λ_q^2 в (2) имеет смысл квадрата частоты коллективных колебаний локализованных спинов, перенормированных из-за наличия зонных электронов:

$$\Lambda_q^2 = \Omega_q^2 + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \Big[(t_p - t_k) \times \times \Big(S_{xx}\big[(J_q - t_k)n_k - (J_q - t_p)n_p\big] + + S_{xy}^{(+)}\big[(J_q - t_k)n_k - (J_q - t_p)(P - n_p)\big] + + S_{yx}^{(-)}\big[(J_q - t_k)(P - n_k) - (J_q - t_p)n_p\big] + + S_{yy}\big[(J_q - t_k)(P - n_k) - (J_q - t_p)(P - n_p)\big]\Big)\Big]. \quad (15)$$

Перенормировка такого свойства обсуждалась ранее в связи с проблемой описания подавления антиферромагнетизма по мере допирования купратов [14, 15]. Наше выражение в этом плане является более полным, так как применимо и для сверхпроводящей фазы. Как и в [13, 15, 16], формула для квадрата затравочной частоты Ω_q^2 (в отсутствие носителей) совпадает с полученной ранее для двумерных парамагнетиков с расцеплением уравнений движения для функций Грина по методу Кондо–Ямаджи [14]:

$$\Omega_q^2 = J_1^2(2 - c_q)[1 + 2K_2 + K_3 - K_1(1 + 2c_q)], \quad (16)$$

где $c_q = \cos(q_x a) + \cos(q_y a)$, $K_n = 4\langle S_0^z\, S_n^z\rangle$ – спин-спиновые корреляционные функции, которые вычисляются самосогласованно. Функция L_q в (2) определяется следующей формулой:

$$L_q = -2J_1K_1(2 - c_q) - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}(n_p - n_k)(t_p - t_k). \quad (17)$$

Видно, что формула (2) имеет правильные пределы. При равенстве нулю чисел заполнения она переходит в выражение для динамической восприимчивости локализованных спинов двумерных антиферромагнетиков со спином $s = 1/2$ [13, 15, 16]. Если в формуле (2) отбросить функцию $F(\omega, \mathbf{q})$ и все выражения с факторами когерентности, то оставшаяся часть имеет сходство с выражением для спиновой восприимчивости, предложенным в работах [17, 18] методом функций памяти для $t{-}J$-модели, где основное внимание было уделено перенормировке восприимчивости локализованных спинов за счет влияния электронов проводимости. Детальное сравнение с [17, 18] затруднено, так как часть функций там осталась не вычисленной, а задавалась феноменологически с привлечением экспериментальных данных. При равенстве нулю спиновых корреляционных функций формула (2) соответствует восприимчивости коллективизированных электронов. Отметим также, что знаменатель восприимчивости для локализованных и зонных спинов в (2) является общим, что естественно для взаимосвязанных подсистем. По нашим расчетам, часть из которых приводится ниже, в слоистых купратах взаимосвязь локализованных и коллективизированных электронов является настолько сильной, что говорить об упрощенной двухкомпонентной модели (локальные моменты + коллективизированные электроны), как это делается в ряде работ, теряет смысл. В частности, это видно из закона дисперсии коллективных спиновых мод, представленного на рис.1. Имеется одна общая мода коллективных

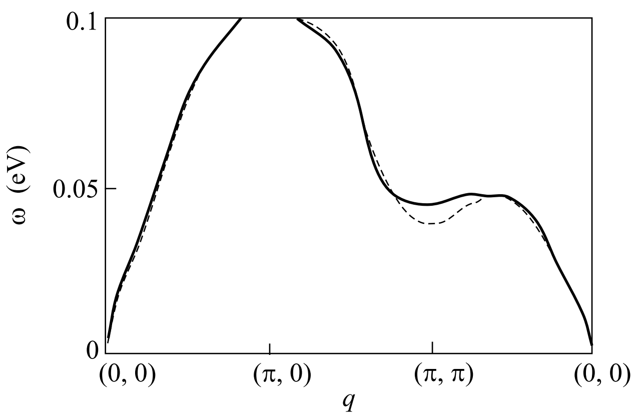

Рис.1. График коллективных спиновых колебаний, рассчитанный из условия обращения в нуль реальной части знаменателя восприимчивости, в сверхпроводящей фазе, при $T = 10$ K (сплошная линия), и в нормальной фазе, при $T = 90$ K. Параметры расчета (в мэВ): $t_1 = 420$, $t_2 = -120$, $\mu = 290$, $\Delta_0 = 23$, $J_1 = 50$, $\Gamma = 2$. Корреляционные функции: $K_1 = -0.12$, $K_2 = 0.009$ (в сверхпроводящей фазе) и $K_1 = -0.11$, $K_2 = 0.007$ (в нормальной фазе)

колебаний спин-системы CuO_2-слоя, активированного дырками. Имеющийся минимум частоты в области антиферромагнитного волнового вектора напоминает поведение моды локализованных спинов. Указанный минимум сдвигается в область высоких частот по мере перехода в сверхпроводящее состояние – это прямое свидетельство влияния восприимчивости коллективизированных дырок.

На рис.2 приведены картины мнимой части восприимчивости, рассчитанные по формуле (2) для нормальной (a) и сверхпроводящей (b) фаз при типичных параметрах для дырочных ВТСП. Видно, что все основные особенности неупругого рассеяния нейтронов (наиболее полные данные для $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ приведены в [19]) замечательно воспроизводятся. В нормальной фазе имеется U-образная мода. В сверхпроводящей же фазе в рельефе мнимой час-

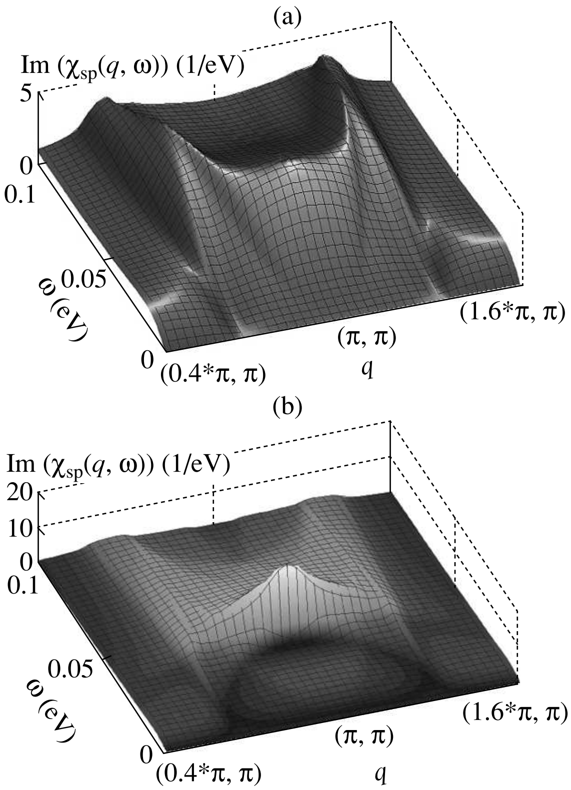

Рис.2. Мнимая часть полной восприимчивости в области волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ в нормальной (a) и в сверхпроводящей (b) фазах. Параметры расчета те же, что и на рис.1

ти восприимчивости имеются два “хребта” одновременно: U-образный, с долиной (по терминологии экспериментаторов – зона молчания) и дугообразный с общим пиком на $Q = (\pi, \pi)$. Параметр P принят равным 0.665, что соответствует форме поверхности Ферми соединения $YBa_2Cu_3O_{6+x}$, а $\Delta_k = \Delta_0 \cos\left((k_x a) - \cos(k_y a)\right)/2$. Затухание учитывается в вычислениях обычной заменой ω на $\omega + i\Gamma$. Вид псевдопотенциала кулоновского взаимодействия G в этой статье мы не обсуждаем, так как оператор спина коммутирует с последним членом гамильтониана (1).

В заключение отметим, что формула (2) может быть применена не только к анализу неупругого рассеяния нейтронов ВТСП. Более того, полученный результат вселяет надежду, что аналогичная формула может быть получена и для других соединений, обладающих локализованными и коллективизированными электронами.

Авторы благодарны P. Bourges и Y. Sidis за обсуждение результатов численного расчета и полезные замечания. Работа выполнена при поддержке Swiss National Science Foundation, Grant # IB7420-110784 и Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 06-0217197-а.

1. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Базовые модели в квантовой теории магнетизма*, Екатеринбург, 2002.
2. S. Pailhes, Y. Sidis, P. Bourges et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 167001 (2004).
3. D. Reznik, P. Bourges, L. Pintschovius et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 207003 (2004).
4. C. Stock, W. J. L. Buyers, R. A. Cowley et al., Phys. Rev. B **71**, 024522 (2005).
5. M. Arai, T. Nishijima, Y. Endoh et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 608 (1999).
6. F. Onufrieva and P. Pfeuty, Phys. Rev. B **65**, 054515 (2002).
7. I. Eremin, D. Morr, A. Chubukov et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 147001 (2005).
8. P. Schnyder, A. Bill, C. Mudry et al., Phys. Rev. B **70**, 214511 (2004).
9. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, R3759 (1988).
10. М. В. Еремин, С. Г. Соловьянов, С. В. Варламов и др., Письма в ЖЭТФ **60**, 118 (1994); J. Phys. Chem. Solids **56**, 1713 (1995); ЖЭТФ **112**, 1763 (1997).
11. N. M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, Phys. Rev. B **51**, 16599 (1995).
12. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C ser.2, **1**, 1650 (1968).
13. A. Yu. Zavidonov and D. Brinkmann, Phys. Rev. B **58**, 12486 (1998).
14. J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
15. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 989 (1992).
16. S. Winterfeldt and D. Ihle, Phys. Rev. B **58**, 9402 (1998).
17. I. Sega, P. Prelovsek, and J. Bonca, Phys. Rev. B **68**, 054524 (2003).
18. A. Sherman and M. Schreiber, Phys. Rev. B **68**, 094519 (2003).
19. V. Hinkov, P. Bourges, S. Pailes et al., cond-mat/0601048.