

К теории неупругого рассеяния нейтронов в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$

*M. B. Еремин¹⁾, A. I. Андреев⁺, И. М. Еремин**

Физический факультет, Казанский государственный университет, 420008 Казань, Россия

+Физико-математический факультет, Марийский государственный университет, 424001 Йошкар-Ола, Россия

**Max-Plank Institute for Physik komplex Systems, Dresden, D-01187, Germany*

Поступила в редакцию 9 июля 2007 г.

Выведена формула для динамической спиновой восприимчивости электронно-допированных ВТСП с учетом сильной взаимосвязи локализованных и коллективизированных электронов. Она позволила объяснить основные особенности неупругого рассеяния нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ при изменении частоты и волнового вектора.

PACS: 71.27.+a, 74.72.-b

Соединение $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ относится к классу электронно-допированных высокотемпературных сверхпроводников. Оно удобнее для экспериментальных исследований, нежели более известное соединение подобного типа $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, так как ионы Pr^{3+} находятся в синглетных основных состояниях [1]. Магнитные моменты ионов Pr^{3+} много меньше, чем у Nd^{3+} , и, следовательно, картина рассеяния нейтронов в этих кристаллах проще. В экспериментальных данных, полученных недавно в работе [2], ярко выделяются две особенности. Первая – в сверхпроводящем состоянии мнимая часть восприимчивости резко пикается на низких энергиях (см. Fig.4 в [2]). Вторая – по мере увеличения энергий нейтронов пик в интенсивности рассеяния раздваивается, образуя “V-shape” около волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$ (см. Fig.3 в [2]), напоминая сильно ослабленное магнонное рассеяние в родительском соединении La_2CuO_4 [3] (см. Fig.3 в [3]). Явление сверхпроводимости, очевидно, связано с коллективизированными электронами, магнонные же моды свидетельствуют о наличии локализованных моментов. Описание этой сложной системы, с дуальным характером магнетизма, одна из важнейших задач физики ВТСП. В настоящем сообщении предложена формула для динамической спиновой восприимчивости, позволившая описать обе, наблюдавшиеся в [2], особенности в поведении неупругого рассеяния нейтронов в $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$.

Формула выведена на основе гамильтониана t - J - G модели [4], который в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma,0} X_j^{0,\sigma} + \sum_{i>j} J_{ij}(S_i S_j) + \sum_{i>j} G_{ij} X_i^{0,0} X_j^{0,0}. \quad (1)$$

Первое слагаемое в (1) описывает перескоки состояния Cu^{3+} по узлам двумерной решетки, занятых состояниями Cu^{2+} , второе слагаемое – суперобменное взаимодействие спинов Cu^{2+} , последнее соответствует кулоновскому взаимодействию носителей тока. Комбинируя методы расцепления уравнений движения как в [5–7] с методом приближения случайных фаз (RPA), мы вывели качественно новое выражение для спиновой восприимчивости, учитывающее двойственный характер магнетизма в ВТСП. Оно имеет вид

$$\chi_{\text{total}}^{+,-}(\omega, q) = \frac{\omega \chi_0 \zeta_t - [\omega \chi_t + 2J_1 K_1(2 - \gamma_q)]\zeta}{\omega \eta \zeta_t + [\Omega_q^2 - \omega^2 - \omega \eta_t]\zeta}. \quad (2)$$

Здесь $\chi_0 = \chi_0(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k \chi_{kq}(\omega)$ – функция спиновой восприимчивости, соответствующая носителям тока, как в теории БКШ,

$$\begin{aligned} \chi_{kq}(\omega) = & S_{xx} \frac{f_k^h - f_{k+q}^h}{\omega + E_k - E_{k+q}} + S_{yy} \frac{f_{k+q}^h - f_k^h}{\omega - E_k + E_{k+q}} + \\ & + S_{yx}^{(-)} \frac{1 - f_k^h - f_{k+q}^h}{\omega - E_k - E_{k+q}} + S_{xy}^{(+)} \frac{f_k^h + f_{k+q}^h - 1}{\omega + E_k + E_{k+q}}, \end{aligned} \quad (3)$$

¹⁾e-mail: Mikhail.Eremin@ksu.ru

$f_k^h = \{1 - \exp[-E_k/k_B T]\}^{-1}$ – ферми-функции в дырочном представлении. Это представление сейчас удобнее, так как в родительском соединении, когда носителей тока нет, нижняя хаббардовская зона состояний полностью заполнена. Для сокращения записи факторов когерентности используются обозначения: $S_{xx} = x_k x_{k+q} + z_k z_{k+q}$, $S_{yy} = y_k y_{k+q} + z_k z_{k+q}$, $S_{xy}^{(+)} = x_k y_{k+q} - z_k z_{k+q}$, $S_{yx}^{(-)} = y_k x_{k+q} - z_k z_{k+q}$, в которых

$$x_k = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right], \quad y_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right], \quad (4)$$

$$z_k = \frac{\Delta_k}{2E_k}, \quad E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}.$$

Зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора задается в соответствии с экспериментальными данными, то есть $\Delta_k = \Delta_1(\cos k_x a - \cos k_y a) + \Delta_4(\cos 3k_x a - \cos 3k_y a)$. Параметры такого типа аппроксимации экспериментальных графиков [8, 9] найдены в [10] (в мэВ): $\Delta_1 = 3.9$ и $\Delta_4 = -2.0$. Закон дисперсии зоны проводимости, как и в работах [11, 12], описываем в приближении сильной связи: $\varepsilon_k = 2t_{\text{eff}}^{(1)}(\cos k_x a + \cos k_y a) + 4t_{\text{eff}}^{(2)} \cos k_x a \cos k_y a + 2t_{\text{eff}}^{(3)}(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a)$. Эффективные параметры задаются в соответствии с фотоэмиссионными данными (в мэВ): $t_{\text{eff}}^{(1)} = 270$, $t_{\text{eff}}^{(2)} = -108$, $t_{\text{eff}}^{(3)} = 27$.

В (2) $\Omega_q^2 = 2J_1^2 \alpha |K_1| (2 - \gamma_q)(2\Delta + 2 + \gamma_q)$ – квадрат частоты колебаний локализованных спинов на узлах меди в отсутствие носителей тока, $\gamma_q = \cos q_x a + \cos q_y a$, $K_1 = 4\langle s_0^z s_1^z \rangle = -0.4$ – спин-спиновая корреляционная функция первых соседей, $\alpha = 1.5$ – параметр расцепления, как в работах [7, 13, 14], $\Delta = 0.001$ – параметр спиновой щели [14], характеризующий, насколько близко частота “магнитной” моды подходит к нулю при значении волнового вектора $Q = (\pi, \pi)$. Второе слагаемое в функции

$$\eta = \eta(\omega, q) = (1 - F_t)\pi(\omega, q) + J_1 \gamma_q \chi_0(\omega, q) \quad (5)$$

хорошо известно. Оно фигурирует в знаменателе формулы для спиновой восприимчивости в RPA, $J_1 \gamma_q$ – фурье-образ параметра суперобменного взаимодействия спинов. Ниже, для численных оценок, мы берем значение $J_1 = 140$ мэВ, то есть как в родительском соединении La_2CuO_4 [3]. Функция $\pi(\omega, q)$ определяется следующим образом:

$$\pi(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k \pi_{kq}(\omega), \quad (6)$$

где

$$\pi_{kq}(\omega) = S_{xx} \frac{t_k f_k^h - t_{k+q} f_{k+q}^h}{\omega + E_k - E_{k+q}} +$$

$$+ S_{yx}^{(-)} \frac{t_k (1 - f_k^h) - t_{k+q} f_{k+q}^h}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \\ + S_{xy}^{(+)} \frac{t_k f_k^h - t_{k+q} (1 - f_{k+q}^h)}{\omega + E_k + E_{k+q}} + \\ + S_{yy} \frac{t_k (1 - f_k^h) - t_{k+q} (1 - f_{k+q}^h)}{\omega - E_k + E_{k+q}}. \quad (7)$$

В выражении для спиновой восприимчивости (2) она появилась из-за того, что в коммутационные соотношения операторов рождения и уничтожения: $[X_i^{\uparrow,0}, X_i^{0,\uparrow}] = P + s_i^z$, $[X_i^{\downarrow,0}, X_i^{0,\downarrow}] = P - s_i^z$ входит оператор спина s_i^z . С физической точки зрения это означает, что в эффективном молекулярном поле, из-за эффектов сильных электронных корреляций, появляется дополнительный источник кинематического происхождения. Величина F_t в (5) является параметром расцепления. Область ее допустимых значений определяется в соответствии с условием устойчивости, то есть так, чтобы мнимая часть восприимчивости оставалась положительной при любых значениях частоты и волнового вектора.

Функция $\zeta = \zeta(\omega, q)$, для нормальной фазы $t-J$ модели, была введена в [7]. При учете сверхпроводимости она записывается в виде

$$\zeta(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k \zeta_{kq}(\omega), \quad (8)$$

где

$$\zeta_{kq}(\omega) = \frac{S_{xx}}{\omega + E_k - E_{k+q}} + \frac{S_{yx}^{(-)}}{\omega - E_k - E_{k+q}} + \\ + \frac{S_{xy}^{(+)}}{\omega + E_k + E_{k+q}} + \frac{S_{yy}}{\omega - E_k + E_{k+q}}. \quad (9)$$

Функции, описывающие связь намагниченностей коллективизированных и локализованных спинов, в (2) таковы:

$$\zeta_t = \zeta_t(\omega, q) = \frac{1}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \zeta_{kq}(\omega), \quad (10)$$

$$\chi_t = \chi_t(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \chi_{kq}(\omega), \quad (11)$$

$$\eta_t = \eta_t(\omega, q) = \frac{P}{N} \sum_k (t_{k+q} - t_k) \eta_{kq}(\omega), \quad (12)$$

где $\eta_{kq}(\omega) = (1 - F_t) \pi_{kq}(\omega) + J_1 \gamma_q \chi_{kq}(\omega)$.

При равенстве нулю чисел заполнения (то есть при отсутствии носителей тока) формула (2) в точности переходит в выражение для восприимчивости локализованных спинов при расцеплении уравнений

движения по схеме Кондо-Ямаджи [13] (см. также [7, 14, 15]). При нулевом спиновом корреляторе K_1 и $F_t = 1$ формула (2) соответствует RPA.

Затравочные интегралы переноса, фигурирующие в гамильтониане (1) и в (10)–(12), связаны с перенормированными (эффективными) параметрами зоны проводимости соотношениями

$$\begin{aligned} t_{\text{eff}}^{(1)} &= t_1 \left[P + \frac{\frac{1}{2} + F_t}{1 + \delta} K_1 \right] - \frac{J_1 + 2G_1}{2N} \sum_{k'} f_{k'} \cos k'_x a, \\ t_{\text{eff}}^{(2)} &= t_2 \left[P + \frac{\frac{1}{2} + F_t}{1 + \delta} K_2 \right] - \\ &- \frac{G_2}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos k'_x a \cos k'_y a, \\ t_{\text{eff}}^{(3)} &= t_3 \left[P + \frac{\frac{1}{2} + F_t}{1 + \delta} K_3 \right] - \frac{G_3}{N} \sum_{k'} f_{k'} \cos 2k'_x a. \end{aligned} \quad (13)$$

Параметр P выражается через число носителей в расчете на одну элементарную ячейку δ соотношением $P = (1 + \delta)/2$; G_1 , G_2 и G_3 – параметры кулоновского взаимодействия первых, вторых и третьих соседей, соответственно. В численных оценках зависимость экранированного кулоновского взаимодействия от расстояния задавалась формулой $G(R) = (e^2/R) \exp(-\sigma_0 R)$, где $\sigma_0 \approx 10^{10} \text{ м}^{-1}$ – параметр экранирования. Следует отметить, что роль кулоновских поправок в (13) относительно мала. Главный эффект перенормировки связан с фактором P и со спиновыми корреляторами K_1 , K_2 и K_3 , значения которых оценивались самосогласованно с учетом правила сумм. То есть среднее значение спинового автокоррелятора $4\langle s_i^z, s_i^z \rangle$, вычисленного с помощью выражения (2), согласовывалось со значением $(1 - \delta)$. При этом требовалось, чтобы эффективные параметры зоны соответствовали экспериментально наблюдаемой поверхности Ферми. В итоге самосогласования параметры гамильтониана оказались равными (в мэВ): $t_1 = 473$, $t_2 = -136.1$, $t_3 = 34.7$, $\mu = 50$.

На рис.1 представлен результат численного расчета мнимой части восприимчивости в сверхпроводящей фазе с использованием следующих параметров: $P = 0.7$, $T = 10 \text{ К}$ и $F_t = 0.65$. Видно, что на волновом векторе $Q = (\pi, \pi)$ в низкочастотной области имеется хорошо выраженный пик. Для того чтобы иметь более четкое представление о высокочастотном поведении мнимой части восприимчивости, на рис.2а и 2б представлены проекции, вид сбоку и вид сверху. Сравнивая эти рисунки с Fig.4 и Fig.3 в [2], соответственно, видим, что результаты

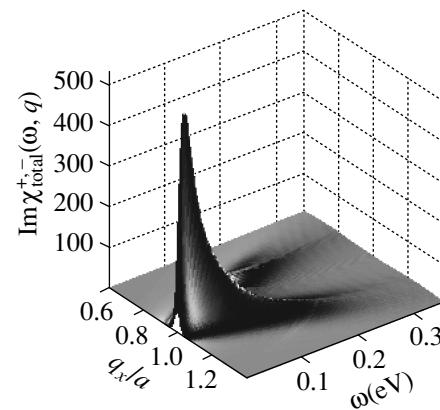


Рис.1. Мнимая часть восприимчивости сверхпроводника $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ в относительных единицах, рассчитанная по формуле (2), как функция частоты (в эВ) и волнового вектора q_x/a (в ед. π), при $q_y = q_x$

расчета, как в качественном, так и в количественном отношении согласуются с результатами экспериментов [2]. Расходящийся V-рельеф напоминает соответствующий рельеф в родительском соединении La_2CuO_4 (см. Fig.3 в [3]), обусловленный магнитной модой. Подчеркнем, что в нашей интерпретации в соединении $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$ дальнего антиферромагнитного порядка не предполагается. Мода локальных колебаний возникла из-за корреляций в ориентации спинов ближайших соседей (short range order). Интересно сравнить крутизну V-рельефа с той, которая определялась бы только колебаниями локальных спинов (то есть только с формулой для Ω_q). Для этой цели, на рис.2б приведен расчет по формуле Ω_q для высокочастотной части (штриховые белые линии), здесь же тонкой черной линией показаны максимумы V-рельефа. Видно, что V-рельеф находится внутри штриховых границ. Это обстоятельство в экспериментальной работе [2] интерпретировано как эффективное (теперь лучше сказать – кажущееся) увеличение обменного интеграла J_1 в сверхпроводнике $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$.

Подводя итог, можно заключить, что предложенная формула для динамической спиновой восприимчивости описывает имеющиеся данные для $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$. Качественно новой складывается общая картина магнетизма в этом соединении. Локализованные моменты на позициях меди и коллективизированные (itinerant) электроны из-за сильной связи между ними настолько сильно переплетены, что говорить о магнетизме каждой из подсистем порознь не имеет смысла. Можно надеяться, что предложенная формула окажется полезной для описа-

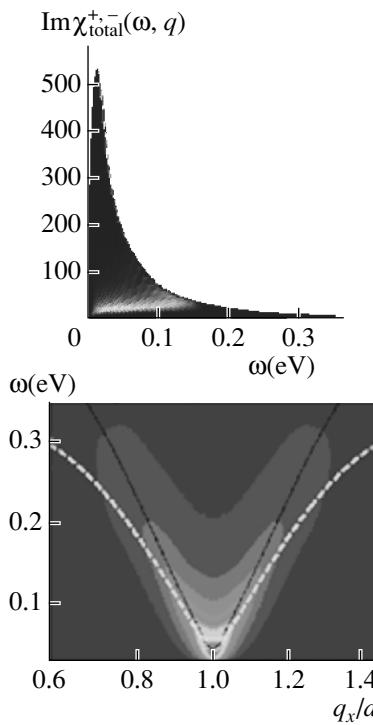


Рис.2. (а) Мнимая часть восприимчивости как функция энергии нейтронов, вид сбоку (отн. ед.); (б) Вид сверху на трехмерный график мнимой части восприимчивости, как функции частоты (в эВ) и волнового вектора $q_x/a = q_y/a$ (в ед. π). Штриховая белая линия соответствует частоте колебаний локальных спинов Ω_q в отсутствие электронов проводимости, тонкая черная – огибающая максимумов $Im \chi_{\text{total}}^{+-}(\omega, q_x)$

ния и других электронно-допированных соединений с двойственным характером магнетизма.

Работа выполнена при поддержке программы Российской фонда фундаментальных исследований, грант # 06-0217197-а.

1. О. Н. Бахарев, А. Г. Володин, А. В. Дуглав и др., ЖЭТФ **101**, 693 (1992).
2. Stephen D. Wilson, Shiliang Li, Hyungje Woo et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 157001 (2006).
3. R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 5377 (2001).
4. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
5. L. M. Roth, Phys. Rev. **184**, 451 (1969).
6. N. M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, Phys. Rev. B **51**, 16599 (1995).
7. A. Yu. Zavidonov and D. Brinkmann, Phys. Rev. B **58**, 12486 (1998).
8. G. Blumberg, A. Koitzsch, A. Gozar et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 107002 (2002).
9. H. Matsui, K. Terashima, T. Sato et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 017003 (2005).
10. М. В. Еремин, И. Е. Любин, А. А. Алеев, Сб. расширенных тезисов *Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости*, М.: ФИАН, 2006, с. 48.
11. D. Manske, I. Eremin, and K. H. Bennemann, Phys. Rev. B **62**, 13922 (2000).
12. J.-P. Ismer, I. Eremin, E. Rossi et al., cond-mat/0702375; Phys. Rev. Lett. **99**, 047005 (2007).
13. J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
14. A. Sherman and M. Schreiber, Phys. Rev. B **68**, 094519 (2003).
15. Г. Джакели, Н. М. Плакида, ТМФ **114**, 426 (1998).