

## МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ДВУХЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

*Д.О.Ливдан, М.А.Стржемечный,  
О.И.Токарь, Д.В.Филь.*

Показано, что в двухзонной модели Хаббарда  $Cu-O$ -плоскости ВТСП дырка на кислороде индуцирует  $RVB$  полярон в  $Cu$ -подсистеме. Это связано с тем, что  $Cu-O$  синглет Райса не может существовать на фоне антиферромагнетизма  $Cu$ -спинов, а требует их  $RVB$  упорядочения.

Принципиальным вопросом для понимания природы ВТСП является объяснение механизма разрушения антиферромагнетизма (АФ) при низком уровне допинга и сопутствующего перехода диэлектрик–металл. Если вакансии в  $CuO_2$ -плоскости ВТСП находятся на кислороде, такая система может быть описана двухзонной моделью Хаббарда, где причиной разрушения АФ является обменное спин-спиновое взаимодействие между  $p$ - и  $d$ -электронами. Такое взаимодействие может приводить <sup>1</sup> к спиновому разупорядочению большого радиуса и разрушению АФ, однако в таком подходе остается открытым вопрос о возможности перехода этой системы в проводящее состояние. Возможность образования поляронов обсуждалась и в <sup>2</sup>, где показано, что ферромагнитное состояние невыгодно. В настоящей работе предлагается следующий механизм разрушения АФ порядка: на АФ фоне возникает  $RVB$  полярон, индуцированный кислородной дыркой, которая стремясь образовать с соседними  $Cu$ -спинами спаренное состояние -- синглет Райса <sup>3</sup>, требует  $RVB$  окружения. Нами показано, что соответствующий параметр  $Cu-O$ -спаривания отличен от нуля в случае  $RVB$  окружения и, напротив, тождественно равен нулю при АФ упорядочении медных спинов. При низких концентрациях кислородная дырка оказывается локализованной в  $RVB$  поляроне и проводимость отсутствует. При дальнейшем допировании, когда радиусы  $RVB$  поляронов перекрываются, вся система медных спинов переходит в  $RVB$  состояние и мы имеем дело с системой взаимодействующих квазичастиц: квазиспинонов и носителей заряда, в котором имеет место спиновый механизм сверхпроводимости <sup>4</sup>.

Мы стартуем с гамильтониана двухзонной модели Хаббарда:

$$H = \epsilon_p \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}^p + \epsilon_d \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^d + U_p \sum_j n_{i\downarrow}^p n_{i\uparrow}^p + U_d \sum_i n_{i\downarrow}^d n_{i\uparrow}^d + H_{p-d}, \quad (1)$$

где  $H_{p-d} = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (d_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \text{э.с.})$ .

Здесь  $n_{i\sigma}^{p(d)} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} (d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma})$ ,  $c^+(d^+)$  – операторы рождения дырки на O (Cu)-узле. Теория возмущений во втором порядке по  $H_{p-d}$  приводит к гамильтониану, в частности дающему Cu–O-обмен и O–O-туннелирование, который можно представить в виде <sup>5</sup>:

$$H^{(2)} = \frac{t^2}{\epsilon} \sum_{\langle ij' \rangle \sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j'\sigma} - \frac{t^2}{\epsilon} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} n_{i\sigma}^d (1 - n_{j\sigma}^p) - \left( \frac{4t^2}{U_p + \epsilon} + \frac{4t^2}{U_d - \epsilon} \right) \sum_{\langle ij \rangle} B_{ji}^+ B_{ij} - \frac{4t^2}{\epsilon} \sum_{\langle jj' \rangle} B_{ji}^+ B_{ij'}, \quad (2)$$

где  $B_{ji}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{j\uparrow}^+ d_{i\downarrow}^+ - c_{j\downarrow}^+ d_{i\uparrow}^+)$  – оператор рождения Cu–O-синглета,  $\epsilon = \epsilon_p - \epsilon_d$ . В (2) операторы  $d$  и  $c$  понимаются умноженными на соответствующие проекторы, учитывающие отсутствие состояний с двумя дырками на узле.

В четвертом порядке по  $H_{p-d}$  имеем Cu–Cu-обмен:

$$H^{(4)} = J \sum_{\langle ii' \rangle} S_i S_{i'}, \quad (3)$$

где  $S_i = 0,5 d_i^+ \sigma d_i$ ;  $J = 4t^4 / \epsilon^2 U_d$ .

Как показано в <sup>3</sup>, основное состояние Cu–O-ячейки с вакансией – это синглет Райса, появление которого в приближении среднего поля можно описать отличным от нуля средним  $\langle B_{ij} \rangle$ . Такое среднее возникает и в Cu–O-плоскости, так что мы будем исследовать критические параметры Cu–O-спаривания при наличии в Cu-подсистеме  $RVB$  <sup>6</sup> и АФ порядков, которые в приближении среднего поля имеют вид:

$$\Delta_{RVB} = \langle d_{i\uparrow} d_{j\downarrow} - d_{i\downarrow} d_{j\uparrow} \rangle \quad (4)$$

$$\Delta_{AF} = \langle S_{iz} \exp(iQR_i) \rangle.$$

Диагонализуя стандартным образом эффективные гамильтонианы, возникающие из (2) и (3) в приближении соответствующего молекулярного поля, получаем систему уравнений самосогласования на параметры порядка и химпотенциалы медной и кислородной подсистем.

В случае  $\Delta_{RVB} = \Delta_{AF} = 0$  мы имеем дело с "чистым" Cu–O-спариванием. Уравнение на критическую температуру  $T_c$ :

$$1 = \frac{J_1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tau^2(\mathbf{k}/2)}{\xi_{\mathbf{k}}} \text{th} \left( \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2T_c} \right) \quad (5)$$

совместно с уравнением на химпотенциал кислородных вакансий

$$\delta = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\exp(\xi_{\mathbf{k}}/T_c) + 1)^{-1} \quad (6)$$

(где  $\xi_{\mathbf{k}} = C, 25J_1\tau^2(\mathbf{k}/2) - \mu_p$ ;  $\tau(\mathbf{k}) = 2(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ ;  $J_1 = 4t^2/\epsilon$ ) дает практически линейную зависимость  $T_c(\delta) \approx J_1\delta/4$ . В случае дальнего АФ порядка уравнение (5) модифицируется в

$$1 = \frac{J_1}{8} \sum_{\mathbf{k}} \tau^2(\mathbf{k}/2) \left[ \frac{\text{th} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2T_c} - \text{th} \frac{S}{2T_c}}{\xi_{\mathbf{k}} - S} + \frac{\text{th} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2T_c} + \text{th} \frac{S}{2T_c}}{\xi_{\mathbf{k}} + S} \right] \quad (7)$$

(где  $S = J\Delta_{\text{АФ}}$ ) решение которого  $T_c(S)$  представлено на рис. 1. Видно, что антиферромагнетизм, который имеет место в ВТСП (где заведомо выполняется условие  $J \gg J_1\delta$ ), разрушает синглет Райса.

В случае  $\Delta_{RVB} \neq 0$  (в отсутствие АФ) уравнение (5) преобразуется к

$$1 = \frac{J_1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{\tau^2(\mathbf{k})}{\xi_{\mathbf{k}}} \text{th} \left( \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2T_c} \right) + \frac{\tau^2(\mathbf{k})R_{\mathbf{k}}^2}{2\xi_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}}^2 - R_{\mathbf{k}}^2)} \text{th} \left( \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2T_c} \right) - \frac{\tau^2(\mathbf{k})R_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}^2 - R_{\mathbf{k}}^2} \text{th} \left( \frac{R_{\mathbf{k}}}{2T_c} \right) - \frac{\tau^2(\mathbf{k})R_{\mathbf{k}}^2}{2\xi_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}}^2 - R_{\mathbf{k}}^2)} \right] \quad (8)$$

(где  $R_{\mathbf{k}} = J\Delta_{RVB}\tau(\mathbf{k})$ ) решение которого в зависимости от  $\Delta_{RVB}$  и  $\delta$  показано на рис. 2.

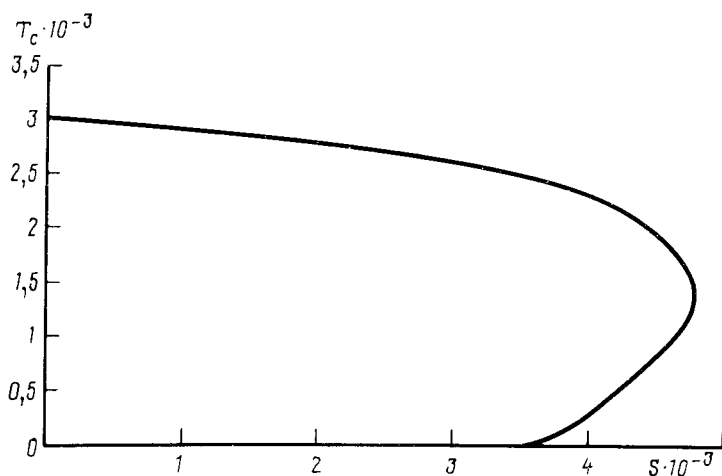


Рис. 1. Зависимость  $T_c$  от величины АФ параметра порядка ( $J_1 = 1$ ) при  $\delta = 0,01$

В то же время, анализ уравнения для  $\Delta_{RVB}$  показывает, что в области  $\delta < (J/J_1)^{1/2}$  влияние Cu–O-спаривания на  $RVB$  несущественно, а при  $\delta > (J/J_1)^{1/2}$   $RVB$  состояние разрушается за счет Cu–O-спаривания. То есть, при  $\delta < (J/J_1)^{1/2}$  сосуществуют  $RVB$  и Cu–O-спаривание.

Таким образом, кислородная вакансия, стремясь образовать (в Cu окружении) синглет Райса, формирует  $RVB$  состояние в ближайшей окрестности, то есть  $RVB$  полярон. Его радиус определяется из условия минимума энергии  $E_{\text{пол}} = -J_1(1 - R^2) + \Delta E_{\text{М}}R^2$ , где первое слагаемое – это выигрыш в результате делокализации синглета Райса в пределах  $RVB$  полярона, (ср. <sup>7</sup>), а второе – проигрыш  $RVB$  порядка по сравнению с АФ ( $\Delta E_{\text{М}} = E_{\text{АФ}} - E_{RVB} \ll J$ ). В

результате  $R_{\text{пол}} = (J_1 / \Delta E_M)^{1/4}$  (в единицах  $a$ ). Соответственно, при концентрации  $\delta_0 = (\Delta E_M / J_1)^{1/2}$  имеют место переходы АФ –  $RVB$  и диэлектрик–металл, а при  $\delta > \delta_0$  во всей системе сосуществуют  $RVB$  и  $\text{Cu-O}$ -спаривания и спиновый механизм сверхпроводимости<sup>4</sup>. При дальнейшем допировании при  $\delta_k \sim (J/J_1)^{1/2}$   $RVB$  упорядочение разрушается за счет подавления  $RVB$   $\text{Cu-O}$ -спариванием и сверхпроводимость исчезает.

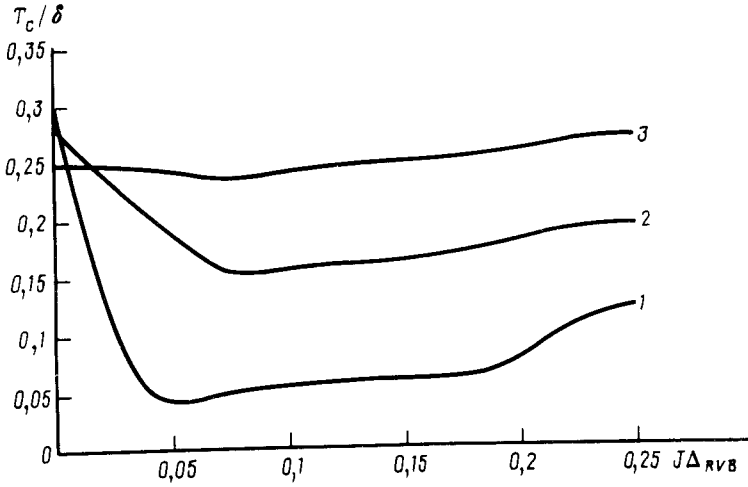


Рис. 2. Зависимость  $T_c$  от величины  $RVB$  параметра порядка ( $J_1 = 1$ ): 1 –  $\delta = 0,01$ ; 2 –  $\delta = 0,05$ ; 3 –  $\delta = 0,2$

В заключение авторы благодарят Л.А.Максимова и Л.И.Глазмана за полезное обсуждение результатов.

#### Литература

1. Глазман Л.И., Иселевич А.С. Письма в ЖЭТФ, 1989, 49, 503.
2. Барабанов А.Ф. и др. ЖЭТФ, 1989, 96, 655.
3. Zhang F.C., Rice T.M. Phys. Rev. B, 1988, 37, 3759.
4. Livdan D.O. et al. Physica C, 1989, 161, 517.
5. Zaanen J., Oles A.M. Phys. Rev. B, 1988, 37, 9423.
6. Baskaran G. et al. Sol. St. Commun, 1987, 63, 973.
7. Андреев А.Ф. Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, 608.

Научно-производственное объединение  
"Монокристаллреактив"

Поступила в редакцию  
16 марта 1990 г.