

О ВЛИЯНИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА ШИРИНУ ПЕРЕХОДОВ 4f-ЭЛЕКТРОНОВ В ТМ-YBCO-СОЕДИНЕНИЯХ

Ж.Ковачевич*¹⁾, Н.М.Плакида

Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Россия

*Факультет естественных наук и математики Университета Черногории
81001 Подгорица, Югославия

Поступила в редакцию 20 января 1993 г.

Исследуется $s - f$ -взаимодействие редкоземельного иона Tm^{3+} со спинами меди в Тм-YBCO-соединениях. Получено выражение для ширины линии переходов в кристаллическом электрическом поле для Tm^{3+} . Показано, что динамические спиновые флуктуации в CuO_2 дают основной вклад в уширение линии.

В недавних экспериментах ^{1,2} по неупругому рассеянию нейтронов была исследована температурная зависимость ширины переходов между основным $\Gamma_3^{(1)}$ и первыми возбужденными уровнями $\Gamma_4^{(1)}$ и $\Gamma_2^{(1)}$ кристаллического электрического поля (КЭП) для ионов Tm^{3+} в высокотемпературном сверхпроводнике $Tm_{0,1}Y_{0,9}Ba_2Cu_3O_{6,9}$ (Тм-YBCO_{6,9}) при энергиях 11,8 мэВ и 14,2 мэВ, соответственно. Было замечено резкое уменьшение ширины линий при температурах $T_S \simeq T_c + 20$ К ($T_c = 92$ К) для обоих переходов. В работе ² эта зависимость для перехода между основным и первым возбужденным уровнем при энергии $\delta = 13,8$ мэВ для несверхпроводящего соединения Тм-YBCO_{6,1} была аппроксимирована выражением $\Gamma \propto \text{Im}\chi(\delta) \cdot \coth\left(\frac{\delta}{2kT}\right)$ в предположении, что мнимая часть магнитной восприимчивости χ не зависит от температуры. Из экспериментальных данных видно, что значения ширины линии Γ для Тм-YBCO_{6,9} при всех температурах меньше, чем соответствующая ширина для Тм-YBCO_{6,1}. Это указывает на то, что фермижидкостной вклад в релаксацию магнитных возбуждений f-ионов Tm^{3+} в КЭП мал.

Вследствие наличия дальнего антиферромагнитного (АФ) упорядочения спинов на узлах $Cu2$ можно ожидать, что главный источник уширения в Тм-YBCO_{6,1} связан со спин-спиновым взаимодействием f -электронов и АФ-спиновых волн. При увеличении концентрации дырок в слое CuO_2 и их делокализации значительно уменьшается магнитная корреляционная длина, дальний порядок исчезает, но сохраняются сильные АФ корреляции спинов в сверхпроводящей и металлической фазах ⁴⁻⁶. Поэтому можно ожидать, что флуктуации спинов в плоскостях CuO_2 обеспечивают основной канал релаксации возбуждений f -электронов, приводя к уширению линии КЭП в Тм-YBCO_{6,9}. В настоящей работе вычисляется температурная зависимость ширины линий возбуждений в КЭП, обусловленных динамическими спиновыми флуктуациями в YBCO_{6,9}.

1. *Модель.* Учитывая результаты экспериментов ⁴ ядерного магнитного резонанса (ЯМР), рассмотрим модель АФ ферми-жидкости, в которой на каждом узле $Cu2$ находится спин $S=1/2$.

¹⁾ Ž.Kovačević, Faculty of Natural Science and Mathematics, University of Montenegro, 81001 Podgorica, Yugoslavia.

Представим гамильтониан редко-земельных (РЗ) ионов и спинов $S=1/2$ на узлах меди в виде:

$$H = H_{CEF} + H_{t-J} + H_{S-F} \quad (1)$$

$$H_{CEF} = \sum_{n,i} \omega_n K_{nn,i}, \quad (2)$$

где $K_{mn,i} = (|m\rangle\langle n|)_i$ – операторы перехода для n, m уровней КЭП,

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + J \sum_{i,j} S_i S_j, \quad (3)$$

гамильтониан $t-J$ -модели описывающей дырки $\hat{c}_{i\sigma}^+ = c_{i\sigma}^+ (1 - n_{i,-\sigma})$ в плоскости CuO_2 и взаимодействие спинов S_i в узлах меди,

$$H_{S-F} = - \sum_{i,j} I_{S-F}^\alpha J_i^\alpha S_j^\alpha, \quad (4)$$

где J_i – оператор полного момента иона Tm^{3+} в узле i , S_j – оператор спина на ближайших к нему узлах меди j , I_{S-F}^α – константа связи косвенного обмена. Отметим, что гамильтониан $S-F$ -взаимодействиях (4) имеет форму, близкую к гамильтониану взаимодействия электронов проводимости с $4f$ -электронами (см.^{3,7}).

При использовании техники дифференцирования по двум временам в методе уравнений движения для двухвременных функций Грина $\langle\langle J_i^-(t) | J_i^+(t') \rangle\rangle$, нетрудно получить массовый оператор $\sum_i(\omega)$ уравнения Дайсона. Ширина уровня $\Gamma_i(\omega)$ определяется мнимой частью массового оператора:

$$\Gamma_i(\delta) = -\coth\left(\frac{\delta}{2kT}\right) \text{Im} \left\{ \sum_i (\delta + i\varepsilon) \right\}, \quad (5)$$

где

$$\sum_i(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{j,j'} \tilde{I}_{ij} \langle\langle S_j^- | S_{j'}^+ \rangle\rangle_\omega \tilde{I}_{ij'}, \quad (6)$$

где суммирование проводится по узлам меди jj' в соседних плоскостях CuO_2 , а

$$\tilde{I}_{ij} = \tilde{I}(i-j) \propto I_{S-F}^{xx} \approx I_{S-F}^{yy}.$$

Переходя к q -представлению, находим:

$$\Gamma(\delta) \propto \coth\left(\frac{\delta}{2kT}\right) \sum_{\mathbf{q}} [F(\mathbf{q})]^2 \cdot \text{Im} \left\{ \chi^{-+}(\mathbf{q}, \delta) \right\}, \quad (7)$$

где

$$F(\mathbf{q}) = 8 \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{bq_y}{2}\right) \cos\left(\frac{cq_z}{6}\right) \quad (8)$$

– форм-фактор ⁴, который учитывает локальную симметрию иона Tm^{3+} в элементарной ячейке $\text{TmBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ с постоянными решетки a, b, c ,

$$\text{Im} \left\{ \chi^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \right\} \equiv \chi''_{-+}(\mathbf{q}, \omega) = - \langle\langle S^- | S^+ \rangle\rangle_{\vec{q}, \omega} \quad (9)$$

– мнимая часть фурье компоненты комплексной обобщенной восприимчивости, связанной с соответствующей запаздывающей функцией Грина.

В недавних работах ⁵ была измерена температурная зависимость мнимой части магнитной восприимчивости для YBCO_{6,92} вблизи АФ волнового вектора $Q_{AF} = (\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; 1, 6)$ и при энергии $\hbar\omega = 10$ мэВ. Эту зависимость можно аппроксимировать с хорошей точностью при $T > 75$ К выражением

$$\chi''(\omega, T) \simeq a \cdot (T - 75)^b \cdot \exp[c(T - 75)], \quad (10)$$

где параметры имеют значения

$$a = 1,22K^{-b}, \quad b = 1,148 \quad \text{и} \quad c = -0,017K^{-1}.$$

Так как в экспериментах измеряется усредненная по векторам q вблизи Q_{AF} спиновая восприимчивость, мы можем предположить, что температурная зависимость сумм по q в (7) будет соответствовать зависимости (10), т.е.

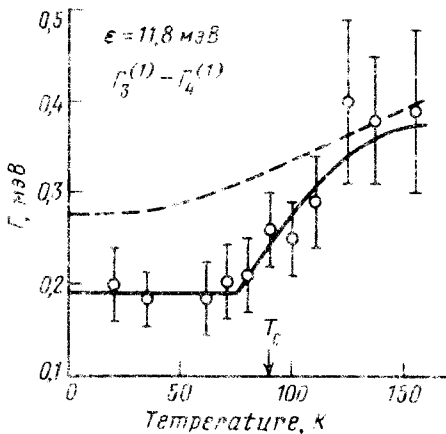
$$\sum_q [F(q)]^2 \cdot \text{Im} \{ \chi^{-+}(q, \delta) \} \propto \chi''(\omega, T). \quad (11)$$

Предполагая, что в ширину линии входит постоянный вклад Γ_0 , не обусловленный динамическими спиновыми флуктуациями, получаем следующее выражение для ширины линии

$$\Gamma(T) = \Gamma_0 + A \cdot \coth\left(\frac{\delta}{2kT}\right) \chi''(\omega, T), \quad (12)$$

где при подгонке (12) к экспериментальным данным ² получены значения параметров

$$\Gamma_0 = 0,187 \text{ мэВ} \quad \text{и} \quad A = 0,172 \cdot 10^{-2} [\text{в соот.ед.}]$$



Температурная зависимость ширины перехода между основным $\Gamma_3^{(1)}$ и первым возбужденным уровнем $\Gamma_4^{(1)}$ при энергии $\varepsilon = 11,8$ мэВ иона Tm^{3+} в $Tm-YBCO_{6,9}$: экспериментальные результаты (с), сплошная кривая (теория), пунктирная кривая - зависимость $\Gamma_0[1 + \coth(\frac{\delta}{2kT})]$.

На рисунке представлены экспериментальные результаты ширины линии при переходе $\Gamma_3^{(1)} \rightarrow \Gamma_4^{(1)}$ с энергией $\varepsilon = 11,8$ мэВ в $Tm-YBCO_{6,9}$ (точки). Пунктирная кривая соответствует зависимости $\coth(\frac{\delta}{2kT})$, а сплошная кривая - результаты расчета (12).

Резкое уменьшение ширины линии наблюдается и в $Tm_{0,1}Y_{0,9}Ba_2(Cu,Zn)_3O_{6,9}$ при температуре $T_S \simeq T_c + 20$ К, где $T_c = 50$ К при концентрации Zn 5%.

Таким образом предложенная модель позволяет объяснить температурную зависимость ширины линий перехода для $4f$ -электронов в КЭП. Резкое уменьшение ширины линий при $T_S \simeq T_c + 20\text{ K} > T_c$ указывает на существенный вклад в уширение линий динамических спиновых флуктуаций, которые имеют при температуре T_S , согласно ЯМР экспериментам ⁶, максимальное значение. Этим данные вещества отличаются от традиционных металлов, например ³, $Tb_xLa_{1-x}Al_2$, где уменьшение ширины линии происходит при $T = T_c$ в связи с образованием сверхпроводящей щели $2\Delta < \delta_{CF}$.

Более последовательный расчет ширины линии (7) с использованием аналитических выражений для $\chi''(q, \omega)$ в рамках $t - J$ -модели предполагается провести в отдельной работе.

Один из авторов (К.Ж.) благодарит дирекцию ОИЯИ за гостепримство и сотрудников ЛТФ ОИЯИ за полезные обсуждения.

-
1. Е.А. Горемычкин, Р. Осборн, А.Д. Тейлор, Письма в ЖЭТФ **50**, 351 (1989).
 2. R. Osborn and E.A. Goremychkin, Physica C **185-189**, 1179 (1991)
 3. P.Fulde, M.Loewenhaupt, Adv. in Phys. **34**, 589 (1986).
 4. M.Takigawa et al., Phys.Rev. B **43**, 247 (1991); A.J.Millis, H. Monien and D.Pines, Phys.Rev. B **42**,167 (1990).
 5. J.Rossat-Mignod et al., Physica C **185-189**, 86 (1991); J.Rossat-Mignod et al., Physica B **180-181**, 383 (1992).
 6. C.Berthier et al., Physica C **185-189**, 1141 (1991).
 7. В.Л.Аксенов, Е.А. Горемычкин Т.Фрауенхайм, Физика металлов и металловедение **55**, 496 (1983).