Релаксационная функция и магнитные свойства слабо допированных слоистых купратов

И.А. Ларионов,
Лаборатория магнитной радиоспектроскопии, Казанский госуниверситет, 420008 Казань, Россия

Метод проекционных операторов применен к двумерной модели сильно коррелированных носителей заряда для объяснения магнитных свойств слабо допированных слоистых купратов в парамагнитном состоянии. Показано, что теория объясняет наблюдаемые экспериментально особенности поведения усредненной по зоне Бриллюэна мнимой части динамической спиновой восприимчивости в широком диапазоне температур и частот.

Магнитные свойства слоистых купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) остаются в центре внимания экспериментальных и теоретических исследований. Особое внимание к свойствам допированных носителями заряда двумерных Гейзенберговских антиферромагнитных (АФ) систем приковано с тех пор, как были описаны магнитные степени свободы родственного ВТСП соединения La_2CuO_4, являющегося АФ изолятором.

В настоящем сообщении будет продемонстрировано, что наблюдаемые в парамагнитной фазе зависимости скорости спин-решеточной релаксации от температуры и индекса допирования можно объяснить, применяя метод проекционных операторов Цванцига-Мори [1,2] к t–J модели, указанной Андерсоном как наиболее перспективной для описания электронных свойств ВТСП купратов. Метод релаксационной функции естественно применим для описания спиновых неравновесных систем и, в частности, при анализе экспериментов по рассеянию нейтронов и магнитной релаксации [3,4].

Гамильтониан t–J модели имеет вид:

$$H=\sum_{ij\sigma}t_{ij}X_i^{\sigma 0}X_j^{0\sigma}+J\sum_{i>j}\left(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j-\frac{1}{4}n_in_j\right), \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_i$ операторы спина 1/2 на узле i и $X_i^{\sigma 0}$ - операторы Хаббарда рождения частиц со спином σ. Интегралы перескока t_{ij} между первыми соседями описывают движение частиц в двумерной решетке, а J = 0.12 эВ - константа суперобменного антиферромагнитного взаимодействия. В терминах операторов Хаббарда операторы спина и плотности n_i имеют вид: $S_i^{\sigma}=X_i^{\sigma\bar{\sigma}}$, $S_i^z=\frac{1}{2}\sum_\sigma \sigma X_i^{\sigma\sigma}$, $n_i=\sum_\sigma X_i^{\sigma\sigma}$, со стандартной нормировкой $X_i^{00}+X_i^{++}+X_i^{--}=1$.

Следуя формализму развитому Мори [2] мы описываем эволюцию динамической переменной, например $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$, которая подчиняется уравнению

$$\dot{S}_{\mathbf{k}}^z(\tau)\equiv\frac{dS_{\mathbf{k}}^z(\tau)}{d\tau}=iLS_{\mathbf{k}}^z(\tau). \quad (2)$$

В общем случае L - оператор Лиувилля, а на языке квантовой механики $iLS_{\mathbf{k}}^z(\tau)$ соответствует коммутатору с гамильтонианом (1). Разложим $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$ на компоненты по отношению к $S_{\mathbf{k}}^z=S_{\mathbf{k}}^z(\tau=0)$:

$$S_{\mathbf{k}}^z(\tau)=R(\mathbf{k},\tau)\cdot S_{\mathbf{k}}^z+(1-\wp_0)S_{\mathbf{k}}^z(\tau), \quad (3)$$

где $R(\mathbf{k},\tau)\equiv(S_{\mathbf{k}}^z(\tau),(S_{-\mathbf{k}}^z)^*)\cdot(S_{\mathbf{k}}^z,(S_{-\mathbf{k}}^z)^*)^{-1}$ - релаксационная функция, $\wp_0 S_{\mathbf{k}}^z(\tau)=R(\mathbf{k},\tau)\cdot S_{\mathbf{k}}^z$.

В дальнейшем удобно ввести набор величин $f_0(\tau)$, $f_1(\tau)$, … , $f_j(\tau)$, …, определяемый уравнениями $f_j(\tau)\equiv exp(iL_j\tau)f_j\equiv exp(iL_j\tau)iL_jf_{j-1}$, $f_0(\tau)\equiv S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$, $L_0=L$, $L_j\equiv(1-\wp_{j-1})L_{j-1}$ и $\Delta_j^2\equiv(f_j, f_j^*)\cdot(f_{j-1}, f_{j-1}^*)^{-1}$, ($j\geq1$). $\{f_j\}$ есть набор ортогональных величин. Использование большего числа f_j дает более точное описание $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$. Подействовав оператором эволюции $exp(iL_n\tau)$ на последнюю величину из этого набора f_n, получаем $f_n(\tau)$, называемую “случайной силой n-го порядка”[2], действующей на переменную $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$ и отвечающей за ее флуктуации.

Применив преобразование Лапласа к релаксационной функции, можно сконструировать представление в виде бесконечной дроби [2], которую Ловезей и Мезерве [5] оборвали на 3-м шаге:

$$\begin{aligned}R^L(\mathbf{k},s)&=\int_0^\infty d\tau e^{-s\tau}R(\mathbf{k},\tau)\\&\approx 1/\{s+\Delta_{1\mathbf{k}}^2/[s+\Delta_{2\mathbf{k}}^2/(s+1/\tau_{\mathbf{k}})]\}\end{aligned} \quad (4)$$

и ввели характерное время $\tau_{\mathbf{k}}=\sqrt{2/(\pi\Delta_{2\mathbf{k}}^2)}$, аргументировав приближение слабой чувствительностью флуктуаций $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$ к характеру случайных сил более высоких порядков и продемонстрировав хорошее согласие с расчетами других авторов и экспериментальными данными по рассеянию нейтронов в антиферромагнетиках как при высоких температурах, так и при температурах немного выше температуры Нееля T_N. $\Delta_{\mathbf{jk}}^2$ связаны с моментами релаксационной функции

$$\langle\omega_{\mathbf{k}}^n\rangle=\frac{1}{i^n}\left[\frac{d^nR(\mathbf{k},\tau)}{d\tau^n}\right]_{\tau=0}, \quad (5)$$

следующим образом

$$\Delta_{1\mathbf{k}}^2=\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle,\quad \Delta_{2\mathbf{k}}^2=\frac{\langle\omega_{\mathbf{k}}^4\rangle}{\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle}-\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle. \quad (6)$$

Процедура вывода аналитических выражений для $\langle \omega_{\mathbf{k}}^2 \rangle$ и $\langle \omega_{\mathbf{k}}^4 \rangle$ приведена в [6]. Аналитическое выражение для *статической* спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{k})$, связанное с антиферромагнитной корреляционной длиной ξ, возьмем из [7]. Полученный таким образом динамический структурный фактор

$$S(\mathbf{k},\omega) = $$

$$= \frac{2\omega\chi(\mathbf{k})\tau_{\mathbf{k}}\Delta_{1\mathbf{k}}^2\Delta_{2\mathbf{k}}^2 /[1-\exp(-\omega/k_BT)]}{[\omega\tau_{\mathbf{k}}(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2-\Delta_{2\mathbf{k}}^2)]^2+(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2)^2}, \quad (7)$$

с максимумами в $\boldsymbol{Q}=(\pi,\pi)$ и $\boldsymbol{q}_0^2 \sim \omega/J$ определяет температурную, частотную и концентрационную зависимость скорости спин-решеточной релаксации,

$$^{\alpha}(1/T_1) = 2\sum_{\mathbf{k}} {}^{\alpha}F(\mathbf{k})^2 S(\mathbf{k},\omega), \quad (8)$$

где $^{63}F(\mathbf{k})^2 = (A_{ab}+4\gamma_{\mathbf{k}}B)^2$ формфактор для ядер меди ^{63}Cu, $A_{ab} = 1.7\times10^{-7}$ eV и $B = 4\times10^{-7}$ eV [8] - константы прямой и перенесенной сверхтонкой структуры. Ось квантования градиента электрического поля совпадает с кристаллографической осью *c*, перпендикулярной плоскости CuO_2. Плоскость CuO_2 определяется, в свою очередь, осями *a* и *b*.

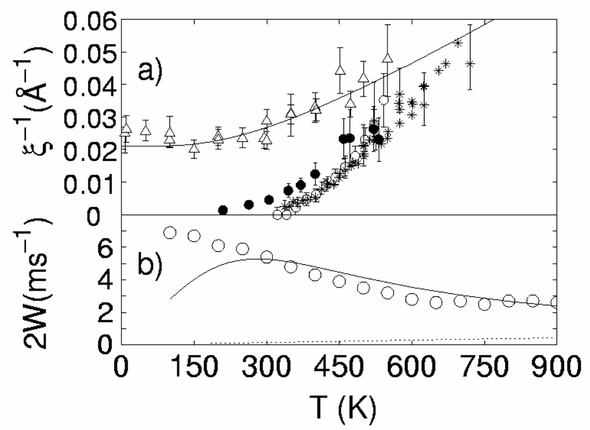

Рис. 1. Температурные зависимости (а) обратной корреляционной длины (сплошная линия - результат, полученый из наилучшего согласия с экспериментальными данными для x=0.04 (треугольники); кружками, звездочками и залитыми кружками показаны экспериментальные данные для La_2CuO_4 [9]) и (b) скорости спин-решеточной релаксации на ядрах ^{63}Cu, 2W=$^{63}(1/T_1)$, лежащих в плоскости CuO_2 (кружки из [10]). Сплошная линия - результат расчета без подгоночных параметров. Пунктирной линией показан вклад от спиновой диффузии.

Из рисунка и формулы (7) видно, что скорость спин-решеточной релаксации, ее зависимость от температуры, в согласии с [8], определяется температурной зависимостью корреляционной длины ξ и фактором k_BT. При низких температурах, где $\xi_{eff}\sim$const, скорость спин-решеточной релаксации, как и следует, пропорциональна температуре, $(1/T_1)\sim T$. При высоких температурах корреляционная длина в образце с $x = 0.04$ ведет себя как в недопированном La_2CuO_4 (см. Рис.) и $^{63}(1/T_1)$ не зависит от концентрации носителей заряда [10]. Таким образом, наш результат согласуется с концепцией почти антиферромагнитной Ферми жидкости (см., например, [8]) и об определяющей роли корреляционной длины в температурной и концентрационной зависимости $(1/T_1)$ и об основном вкладе в $^{63}(1/T_1)$ от волновых векторов $\mathbf{q}\approx Q=(\pi,\pi)$.

На рис. 1b) пунктирной линией показан вклад в $^{63}(1/T_1)$ от малых $\mathbf{k}$. Как видно из рисунка, этот вклад мал и в согласии с теорией линейного отклика и гидродинамического подхода вклад в $^{\alpha}(1/T_1)$ от малых $\mathbf{k}$ имеет вид [6],

$$^{\alpha}(1/T_1)_{Diff} = \frac{^{\alpha}F(0)^2 k_BTa^2\chi_S}{\pi\hbar D}\Lambda, \quad (9)$$

где $D\approx 2.6J$ – коэффициент спиновой диффузии и $\Lambda \sim \ln(1/q_0^2) \sim \ln(const\cdot J/\omega)$. Численные значения Λ, например, таковы: $\Lambda(33\,\text{MHz}) = 2.52$, $\Lambda(52\,\text{MHz}) = 2.44$ и $\Lambda(81.4\,\text{MHz}) = 2.37$. Вклад в $^{63}(1/T_1)$ от волновых векторов $\mathbf{q}\approx Q = (\pi,\pi)$ в (8) рассчитывался прямым суммированием и при $\omega << J$ практически не зависит от ω.

Работа выполнена при поддержке Российской государственной технологической программы «Сверхпроводимость» № 98014-4 и совместного гранта фонда CRDF-BRHE (США) и Министерства образования России № Y1-P-07-19.

1. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961); R. Zwanzig, K.S.J. Nordholm, and W.C. Mitchell, Phys. Rev. A **5**, 2680 (1972).

2. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965); **34**, 399 (1965).

3. Dieter Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions*, Frontiers in Physics, Vol. 47, (Benjamin, Reading, MA, 1975); [Русский перевод: Дитер Форстер, *Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции*, М., Атомиздат, 1980].

4. И.В. Александров, *Теория магнитной релаксации. Релаксация в жидкостях и твердых неметаллических парамагнетиках*, М., Наука, 1975.

5. S.W. Lovesey and R.A. Meserve, J. Phys. C **6**, 79 (1973).

6. I.A. Larionov, Phys. Rev. B **69**, 214525 (2004); also in cond-mat/0401514 (xxx.lanl.gov).

7. A.Yu. Zavidonov and D. Brinkmann, Phys. Rev. B **58**, 12486 (1998); A.Yu. Zavidonov, I.A. Larionov and D. Brinkmann, Phys. Rev. B **61**, 15462 (2000).

8. Y. Zha, V. Barzykin, and D. Pines, Phys. Rev. B **54**, 7561 (1996).

9. Y. Endoh, et al., Phys. Rev. B **37**, 7443 (1988); B. Keimer, et al., Phys. Rev. B **46**, 14034 (1992); R.J. Birgeneau, et al., Phys. Rev. B **59**, 13788 (1999).

10. T. Imai, C.P. Slichter, K. Yoshimura, and K. Kosuge, Phys. Rev. Lett. **70**, 1002 (1993).