

РАСЩЕПЛЕНИЕ ЗОН И ОТНОСИТЕЛЬНОЕ СПИНОВОЕ ВЫСТРАИВАНИЕ В ДВУХСЛОЙНЫХ СИСТЕМАХ

А. А. Овчинников^{*ab}, М. Я. Овчинникова^a

^a Объединенный институт химической физики Российской академии наук
117977, Москва, Россия

^b Институт физики комплексных систем М. Планка
Д-01187, Дрезден, Германия

Поступила в редакцию 31 мая 2001 г.

Показано, что в двухслойных коррелированных $2D$ -системах одночастичные спектры нижней хаббардовской зоны резко различаются при различном относительном выстраивании спиновых систем слоев. В частности, двухслойное расщепление зон отлично от нуля при одинаково направленных чередующихся спинах разных слоев (F_z -конфигурация), но стремится к нулю для противоположного выстраивания (AF_z -конфигурация). Обнаружена смена типа выстраивания основного состояния при увеличении допирования δ с нижней AF_z -конфигурации на F_z -конфигурацию выстраивания при больших δ . Поведение двухслойного расщепления в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ дает основания для гипотезы о возможной перестройке конфигурации выстраивания $F_z \rightarrow AF_z$, происходящей одновременно со сверхпроводящим переходом. Эффекты влияния спинового выстраивания на спектр магнитных возбуждений как способ изучения спиновой структуры двухслойных систем обсуждаются на примере однородных решений эффективных спиновых моделей.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 71.10.Nf

1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из особенностей ВТСП — зависимость их свойств от числа CuO_2 -плоскостей — указывает на важность взаимодействия между ближайшими слоями. В недавних фотоэмиссионных экспериментах (ARPES) [1–3] впервые обнаружено двухслойное расщепление зон и поверхностей Ферми в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO). Ранее именно отсутствие двухслойного расщепления в прежних фотоэмиссионных экспериментах дало Андерсону и др. основания предложить механизм сверхпроводимости, предполагающий когерентный межслойный перенос сразу двух частиц при подавленном одночастичном переносе [4]. Новые эксперименты меняют взгляд на проблему. Необычным в новых данных [2] является существенное уменьшение двухслойного расщепления в области $k \sim (\pi, 0)$ при переходе в сверхпроводящее состояние [2]. Пока нет единого мнения о топологии поверхности Ферми в этой

области k . Продолжается дискуссия относительно электронного [5–7] или дырочного [8–10] характера поверхности Ферми вблизи $k \sim (\pi, 0)$ при общепризнанном дырочном характере основных сегментов поверхности Ферми вокруг направлений $k_x = k_y$. Другое явление, наблюдаемое только в двухслойных (но не монослойных) купратах, — появление в сверхпроводящем состоянии магнитного резонанса в неупругом рассеянии нейтронов [11–16].

Объяснение этих различий важно для понимания электронной структуры купратов, обладающих многими свойствами допированного моттовского диэлектрика. Главным признаком последнего является хаббардовское расщепление зоны. Оно связано с антиферромагнитными корреляциями. Хотя дальний антиферромагнитный $2D$ -порядок исчезает при малом допировании, $\delta_c = 1 - n_c \sim 0.05$, локальный спиновый $2D$ -порядок, по-видимому, сохраняется в достаточно большой области допирования, включая область сверхпроводимости. В пользу этого говорят данные по μ -МР, ЯМР, ЯКР [17, 18], большая длина спиновых корреляций с $Q = (\pi, \pi)$ и плавная эво-

*E-mail: aovchin@mpipks-dresden.mpg.de

люция коллективных магнитных возбуждений при допировании (см. обзор [11]), наблюдение теневых границ Ферми и др. Наконец, недавно [19, 20] получены прямые доказательства (по брэгговским рефлексам) антиферромагнитного порядка даже в сверхпроводящем состоянии $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ в наносекундном диапазоне.

Детальный анализ антиферромагнитных зон и взаимодействий с использованием модели Хаббарда дан в классической работе [21]. Простой метод среднего поля дает завышенные величины чередующегося спина d_0 и границы $\delta_c \sim 0.45$ области антиферромагнитного спинового порядка. Перенормировка зон на базе нулевого антиферромагнитного приближения [21], расчеты на основании $t-t'-U$ -модели Хаббарда в технике слейв-бозонов [22] или на базе состояний с корреляциями типа валентных связей [23] снижают величину d_0 и дают границу $\delta_c \sim 0.3$ исчезновения локальной намагниченности. Согласно [23] область $\delta < \delta_c$ включает в себя и область сверхпроводимости. Сохранение хаббардовского расщепления зоны при $\delta < \delta_c$ как для модели $t-t'-U$ [23], так и для модели $t-t'-J$ [24–26] влечет за собой изменение топологии поверхности Ферми при оптимальном допировании с переходом от дырочных карманов к большой поверхности Ферми с сегментами электронного и дырочного типов.

Если такая картина верна, то взаимодействие между слоями в двухслойных системах и спектр магнитных возбуждений могут существенно зависеть от относительной ориентации (выстраивания) локальных чередующихся спинов двух слоев, даже если эта ориентация в строгом смысле не стационарна, а сохраняется лишь на характерном временном масштабе. В случае малой разницы энергий конфигураций с разным выстраиванием спинов можно ожидать сильного влияния допирования и температуры на свойства магнитных возбуждений. Поиск такого рода эффектов помог бы прояснить происхождение магнитного резонанса в рассеянии нейтронов в YBCO , BSCCO .

В настоящей работе проведен вариационный расчет зон, полных энергий, фазовых кривых $T_c(\delta)$ и расщеплений в двухслойной $t-t'-U$ -модели Хаббарда. Расчет выполнен на базе коррелированных состояний с корреляциями типа валентных связей — зонного аналога RVB-состояний Андерсона. Ранее [23] было показано, что так называемое взаимодействие коррелированных прыжков (correlated hopping interaction), возникающее в эффективном гамильтониане при образовании валентных связей, обеспечивает притяжение дырок в d -канале и со-

ответствующую d -сверхпроводимость, совместимую с антиферромагнитным спиновым порядком. Здесь мы используем тот же метод для исследования эффектов взаимодействия двух слоев, т. е. предполагаем внутрислойный механизм спаривания и, в отличие от механизма Андерсона и др. [4], не усиливаем его искусственным когерентным межслойным переносом пар. Нас интересовали следующие вопросы: сохранится ли большая по допированию область антиферромагнитного спинового порядка и если да, то каково относительное выстраивание спиновых систем двух слоев и двухслойное расщепление зон при различном допировании. В методе, который мы используем, хаббардовское расщепление сохраняется вплоть до величины оптимального допирования.

Подчеркнем различие подходов данной работы и исследования [27] двухслойной модели Хаббарда методом FLEX (fluctuation exchange). Согласно FLEX, притяжение дырок и перенормировка зон, в частности двухслойного расщепления, обязаны обмену спиновыми флуктуациями. Последние описываются усредненной изотропной восприимчивостью $\chi''(q, \omega)$ с пиком при $k \rightarrow (\pi, \pi)$. Но RPA-рассмотрение [21, 28, 29] на основе антиферромагнитно расщепленной зоны обнаруживает низкочастотную моду лишь для спиновых возбуждений, поперечных по отношению к вектору \mathbf{d}_0 локального чередующегося спина. Вклад таких флуктуаций во взаимодействие частиц нижней хаббардовской зоны подавлен обращением в нуль на линиях нестинга соответствующих матричных элементов [21, 30]. Это означает, что притяжение дырок определяется близкими ($\sim a$) антиферромагнитными корреляциями (в отличие от длинноволновых флуктуаций в методе FLEX). В простейшем варианте такие флуктуации отвечают образованию валентных связей, т. е. синглетов связей ближайших узлов. Именно такая модель будет использоваться ниже, хотя учет валентных связей только одного типа может вносить погрешность.

В отличие от усредненного рассмотрения метода FLEX, мы проводим расчет двух конкретных конфигураций двухслойной системы — с параллельным или антипараллельным (противоположным) выстраиванием чередующихся спинов двух слоев. Будем обозначать их соответственно как F_z - и AF_z - («ферро- и антиферромагнитное по z ») выстраивание, хотя оба случая отвечают локальному антиферромагнитному спиновому порядку в каждом слое. Оставляя вне рассмотрения другие возможные конфигурации (спиральные или страйп-фазы), мы не ожидаем буквальной применимости результатов к купра-

там, нейтронные измерения в которых часто указывают на наличие несоизмеримых структур. Тем не менее эффекты, обнаруженные в модельных расчетах двух исследуемых структур, могут быть полезны при обсуждении наблюдаемого двухслойного расщепления и магнитных свойств двухслойных купратов.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Начнем с хаббардовского гамильтониана двухслойной системы

$$H = \sum_{\gamma} H_{\gamma}(U, t) + \Delta H(t', t_z) = \sum_{n, m} \sum_{\gamma, \gamma', \sigma} t_{\gamma n, \gamma' m} (c_{\gamma, n, \sigma}^{\dagger} c_{\gamma', m, \sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{n, \gamma} n_{\gamma, n, \uparrow} n_{\gamma, n, \downarrow}. \quad (1)$$

Здесь n, m — $2D$ -индексы узлов плоскости, $\gamma, \gamma' = 0, 1$ — индексы слоя, $t_{\gamma n, \gamma' m}$ — интегралы перескока. Главные взаимодействия $H_{\gamma}(U, t)$ внутри каждого слоя γ определяются стандартными параметрами t, U модели Хаббарда. Дополнительный член $\Delta H(t', t_z)$ включает прыжковые взаимодействия t', t_z между следующими за соседними центрами внутри слоя и между центрами разных слоев. Знаки стандартных параметров сильной связи t, t', t_z определены так, что нулевые зоны (при $U = 0$) имеют вид

$$\epsilon_{\pm}^{(0)} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y \mp \frac{1}{4} t_z (\cos k_x - \cos k_y)^2. \quad (2)$$

Зависимость от k расщепления $\Delta\epsilon(k) = \epsilon_+ - \epsilon_-$ связывающей и антисвязывающей (по z) нулевых зон выведена в [27, 31, 32].

Вариационное коррелированное состояние Ψ с корреляциями типа валентных связей строится [23] с помощью унитарного преобразования некоррелированного состояния Φ :

$$\Psi = \hat{W}(\alpha)\Phi, \quad \hat{W}(\alpha) = \exp\left[\alpha \sum_{\gamma} Z_{\gamma}\right], \quad (3)$$

$$Z_{\gamma} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, (nm)} (c_{\gamma, n, \sigma}^{\dagger} c_{\gamma, m, \sigma} - \text{H.c.})(n_{\gamma, n, -\sigma} - n_{\gamma, m, -\sigma}). \quad (4)$$

Выбор унитарного оператора $W(\alpha)$ с вариационным параметром α обоснован в [23]. Вариационное рассмотрение задачи с исходным гамильтонианом H в базисе коррелированных состояний Ψ эквивалентно рассмотрению эффективного гамильтониана

$$H_{\text{eff}}(\alpha) = W^{\dagger}(\alpha) H W(\alpha) \approx \sum_{\gamma} \{H_{\gamma}(t, U) + \alpha[H_{\gamma}, Z_{\gamma}] + \frac{\alpha^2}{2} [[H_{\gamma}, Z_{\gamma}], Z_{\gamma}]\} + \Delta H(t', t_z) \quad (5)$$

методом среднего поля. Для эффективного гамильтониана используем приближенное выражение: ограничиваемся членами до второго порядка по вариационному параметру α ($\alpha \sim 0.22$ при $U/t \sim 8$) для основных взаимодействий $H_{\gamma}(U, t)$ и нулевым порядком по α для вклада $\Delta H(t', t_z)$ дополнительных взаимодействий, снимающих вырождение энергий вдоль линий нестинга.

В качестве некоррелированной функции $\{\Phi\}$ используем функцию модели БКШ с аномальными средними d -симметрии и антиферромагнитным спиновым порядком. Для гамильтониана (1) средняя энергия по такому состоянию

$$\langle H \rangle_{\Psi} = \langle H_{\text{eff}} \rangle_{\Phi} = \bar{H}(y_{\gamma\nu}, z) \quad (6)$$

находится как явная функция от набора одноэлектронных средних $y_{\nu} = \langle \hat{y}_{\nu} \rangle_{\Phi}$, $z = \langle T_z \rangle_{\Phi}$ по некоррелированному состоянию Φ (ниже для краткости индекс Φ в средних $\langle \rangle_{\Phi}$ опущен). Набор этих средних включает компоненты плотности $r_{\gamma l}$ ($|l| = 0, 1, \sqrt{2}, 2, \sqrt{5}, 3$), аналогичные компоненты чередующегося спина $d_{\gamma l}$ ($|l| = 0, \sqrt{2}, 2$), аномальные средние $w_{\gamma l}$ d -симметрии ($|l| = 1, 2, \sqrt{5}, 3$) для каждого слоя $\gamma = 0, 1$ и величину z , определяющую среднее от одноэлектронного прыжкового взаимодействия между слоями $\langle T_z \rangle = -t_z z$:

$$\begin{aligned} r_{\gamma l} &= \frac{1}{2N} \sum_{n, \sigma} \langle c_{\gamma, n, \sigma}^{\dagger} c_{\gamma, n+l, \sigma} \rangle, \\ d_{\gamma l} &= \frac{1}{2N} \sum_{n, \sigma} (-1)^n \frac{\sigma}{|\sigma|} \langle c_{\gamma, n, \sigma}^{\dagger} c_{\gamma, n+l, \sigma} \rangle, \\ w_{\gamma l} &= \frac{1}{2N} \sum_n \text{sign}(l_x^2 - l_y^2) \times \\ &\quad \times \langle c_{\gamma, n, \uparrow}^{\dagger} c_{\gamma, n+l, \downarrow} + \text{H.c.} \rangle, \\ z &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{2} \langle [c_{1, k, \sigma}^{\dagger} c_{2, k, \sigma} + \text{H.c.}] \rangle \times \\ &\quad \times \frac{(\cos k_x - \cos k_y)^2}{4}. \end{aligned} \quad (7)$$

В силу симметрии все величины в (5) зависят только от модуля $l = |\mathbf{l}|$, но не от направления вектора \mathbf{l} , и компоненты плотности r_l одинаковы для двух слоев (не зависят от γ). Для спиновых и аномальных компонент исследуем следующие 4 варианта относительного выстраивания:

$$\begin{aligned} d_{\gamma=1,l} &= \zeta_d d_{\gamma=0,l}, & \zeta_d &= \pm 1; \\ w_{\gamma=1,l} &= \zeta_w w_{\gamma=0,l} = w_l, & \zeta_w &= \pm 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Самосогласованная процедура минимизации средней энергии \bar{H} по Φ при фиксированном вариационном параметре α и последующая минимизация по α стандартны [23]. Искомое решение Φ определяется заполнением нижних одноэлектронных состояний линейаризованного гамильтониана

$$\begin{aligned} H_{lin} &= \sum_{\nu,\gamma} \frac{\partial \bar{H}}{\partial y_{\gamma\nu}} (\hat{y}_{\gamma\nu} - y_{\gamma\nu}) + t_z (\hat{z} - z) + \\ &+ \bar{H}(y_{\gamma\nu}, z) = \sum_k^F \hat{h}_k + \text{const}. \end{aligned} \quad (9)$$

В свою очередь Φ определяет параметры порядка $\{y_{\gamma\nu}, z\}$, замыкая процедуру самосогласования. Операторы $\hat{y}_{\gamma\nu}, \hat{z}$ отвечают средним (7) соответственно. Вектор k в (9) пробегает значения внутри магнитной зоны Бриллюэна F ($|k_x + k_y| \leq \pi$), а оператор \hat{h}_k в (9) имеет вид

$$\hat{h}_k = h_{ij}(k) b_{ik}^\dagger b_{jk} \quad (10)$$

в базисе следующих операторов намбу-представления:

$$\begin{aligned} b_{ik}^\dagger &= \{c_{0,k,\uparrow}^\dagger, c_{0,\bar{k},\uparrow}^\dagger, c_{0,-k,\downarrow}, c_{0,-\bar{k},\downarrow}, c_{1,k,\uparrow}^\dagger, \\ &c_{1,\bar{k},\uparrow}^\dagger, c_{1,-k,\downarrow}, c_{1,-\bar{k},\downarrow}\}_i, \quad (11) \\ i &= 1, \dots, 8; \quad \tilde{k} = k + (\pi, \pi). \end{aligned}$$

Отличие данного расчета от [23] состоит в удвоении базиса ферми-операторов в двухслойной системе. Структура матрицы $h_{ij}(k)$ в (10) объяснена в Приложении.

Расчет фазовых кривых $T_c(\delta)$ сверхпроводящего перехода для двух вариантов симметрии аномальных средних ($w_{1l} = \pm w_{2l}$) проводился по формулам (П.9)–(П.11). При этом сохранялась лишь главная гармоника с $l = 1$ в (7). Ранее мы убеждались в достаточной точности такого приближения при расчетах $T_c(\delta)$. Напомним, что само e - e -спаривание в данном подходе обязано образованию валентных связей — синглетов частиц соседних узлов [23]. Преобразование $W(\alpha)$ в (3), описывающее эти корреляции,

добавляет к H_{eff} взаимодействие коррелированных прыжков (индекс γ ниже опущен)

$$\begin{aligned} V &\sim \alpha U \sum_{\langle mn \rangle, \sigma} (c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} + \text{H.c.}) \times \\ &\times (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma} - 2n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}). \end{aligned} \quad (12)$$

Хирш первым показал, что взаимодействия такого типа могут обеспечивать притяжение между частицами [33]. Для каждой связи $\langle nm \rangle$ взаимодействие (12) содержит шестифермионный вклад $V_{nm}^{(6)} \sim \alpha U c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}$, обеспечивающий притяжение дырок в d -канале. Такой член был опущен в усеченном взаимодействии коррелированных прыжков вида $V_{nm} \sim c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma})$, использованном Хиршем. Последнее применялось Хиршем к добавочным дыркам кислородной системы с малой концентрацией. Оно способно обеспечить притяжение лишь в s -канале. Но однозонная модель Хаббарда (2) относится к гибридованной p - d -зоне с большой, порядка единицы, суммарной концентрацией дырок, и s -сверхпроводимость подавлена сильным отталкиванием U . Между тем существенный при большой концентрации член вида $V^{(6)}$ способен обеспечить притяжение в d -канале. Среднее от этого члена содержит вклад, пропорциональный $r_1 w_1^2$, с аномальными средними d -симметрии. В итоге для средней энергии каждого слоя получим выражение

$$\begin{aligned} \bar{H}_{1L} &= \bar{H}_{1L}(r_l, d_l) + \kappa_{ll} w_l w_l, \\ \kappa &= \kappa_{11} = -8\alpha U r_1 + O(\alpha^2) < 0 \end{aligned} \quad (13)$$

с отрицательной главной константой k_{11} сверхпроводящего спаривания.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Обсудим сначала на качественном уровне влияние сверхпроводящего перехода на расщепление зон в двухслойной системе $\{a_k, b_k\}$ без антиферромагнитного порядка. В нормальном состоянии расщепление зон (2) согласно [27] равно

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon_k^N &= 2t_z \varphi_z(k), \\ \varphi_z(k) &= (\cos k_x - \cos k_y)^2 / 4. \end{aligned} \quad (14)$$

В пределе большого внутрислойного притяжения частиц и большой сверхпроводящей щели ($\Delta_{sc} > \Delta \epsilon^N$) в нулевом по V_{ab} приближении волновая функция сверхпроводящего состояния равна произведению $\Phi_0 = \Phi^a \Phi^b$ волновых функций БКШ-типа

каждого слоя. Расщепление возбужденных состояний, возникающих при фотоэмиссии из такого основного состояния, равно

$$\Delta\epsilon^{sc} = -2\langle\Phi_0\beta_{k\uparrow}|V_{ab}|\alpha_{k\uparrow}^\dagger\Phi_0\rangle = (v_k^a v_k^b - u_k^a u_k^b)\Delta\epsilon^N. \quad (15)$$

Здесь α^\dagger , β^\dagger — операторы рождения квазичастиц, $\alpha^\dagger = u_k^a a_{k\uparrow}^\dagger - v_k^a a_{-k\downarrow}$ и аналогично для β^\dagger с соответствующими коэффициентами u, v . В результате для отношения двухслойных расщеплений в нормальном и сверхпроводящем состояниях получим

$$\Delta\epsilon^{sc}/\Delta\epsilon^N = \frac{1}{2}(1-\zeta_w) + \frac{1}{2}(1+\zeta_w)\frac{\xi_k}{(\xi_k^2 + \Delta_{sc}^2)^{1/2}}, \quad (16)$$

где $\xi_k = \epsilon_k - \mu$, Δ_{sc} — сверхпроводящая щель и $\zeta_w = w_1^a/w_1^b = \pm 1$ определяется симметрией аномальных средних слоев a и b согласно (8). Таким образом, оценка первого порядка по межслойному взаимодействию предсказывает, что при сверхпроводящем переходе двухслойное расщепление в области границы Ферми ($\xi_k = 0$) обращается в нуль или остается неизменным в зависимости от относительного знака аномальных средних двух слоев.

Аналогичные оценки для системы с антиферромагнитным спиновым порядком показывают, что двухслойное расщепление состояний нижней хаббардовской зоны зависит от относительной ориентации ($\zeta_d = \pm 1$) чередующихся спинов слоев в (8). В нормальном состоянии оно равно

$$\Delta\epsilon_k^N = -t_z\varphi_z(k)\left\{\frac{1}{2}(1+\zeta_d) + \frac{1}{2}(1-\zeta_d)\frac{\epsilon_k - \epsilon_{\tilde{k}}}{2G_k}\right\}, \quad (17)$$

$\tilde{k} = k - (\pi, \pi)$, $G_k = [(\epsilon_k - \epsilon_{\tilde{k}})^2/4 + \Delta_{AF}^2]^{1/2}$ и $\Delta_{AF} \sim Ud_0$ — хаббардовское расщепление зоны. На линиях нестинга и, в частности, в точке $(\pi, 0)$ двухслойное расщепление (17) обращается в нуль для AF_z -конфигурации ($\zeta_d = -1$) и совпадает с невозмущенным взаимодействием для F_z -конфигурации ($\zeta_d = 1$). В последнем случае переход в сверхпроводящее состояние снижает двухслойное расщепление в случае одинакового знака аномальных средних ($\zeta_w = 1$).

Таким образом, антиферромагнитный спиновый порядок блокирует двухслойное расщепление в случае конфигурации AF_z (но не F_z) и сверхпроводящий переход может влиять на него. Численные расчеты подтверждают это.

Скажем предварительно о выборе параметров модели (1), (2). Для отношения основных параметров использовалось значение $U/t = 8$, следующее из кластерного вывода однозонной модели [34, 35]. Другой параметр t' , благодаря вкладу $\delta\epsilon^{(0)} = 4t'\cos k_x \cos k_y$ в дисперсию зоны, регулирует положение ван-хововской особенности (VHS) в плотности состояний $E_{VHS} = E(\pi, 0)$ относительно края нижней хаббардовской зоны. В однослойных $t-t'-U$ - или $t-t'-J$ -моделях величина t' однозначно связана с оптимальным допированием δ_{opt} , так как максимум T_c отвечает совпадению химического потенциала μ с E_{VHS} . Согласно расчетам [23–27], разумные значения $\delta_{opt} \sim 0.2-0.25$ влекли за собой $t'/t \sim 0.05-0.1$. Эти величины отличны от оценок $t'/t \sim 0.2-0.4$, полученных из обработки фотоэмиссионных данных и квантовохимических зон на базе приближения сильной связи. Отметим принципиальное различие подходов. В первом случае хаббардовское расщепление зоны сохраняется в значительной области допирования, $\delta \leq 0.3$, во втором подходе подразумевается единая нерасщепленная зона всюду, кроме области антиферромагнитного диэлектрического состояния $\delta \leq 0.05$. В поиске аргументов в пользу одного или другого мы варьировали параметр t' в пределах $0.05-0.3$.

Параметр межслойного взаимодействия также варьировался в пределах $t_z/t = 0.07-0.3$. Прежние расчеты [27, 31, 32] дали неперенормированную величину $t_z/t \sim 1/3$. Недавние измерения (ARPES) двухслойного расщепления $\Delta = 2t_z = \delta\epsilon_k(\pi, 0)$ [1, 2] дали величину $t_z/t \leq 0.1$. Определение знаков t_z в (2) и t_\perp в [1, 2] отвечает соотношению $t_z = -t_\perp$.

Начнем с моделей с малыми t', t_z , обладающих более высокой плотностью состояний на границе Ферми и более высокой T_c .

На рис. 1 представлена зависимость от допирования разницы $\Delta H = \bar{H}(AF_z) - \bar{H}(F_z)$ средних энергий двухслойной системы для двух типов относительного выстраивания спинов слоев. Отметим следующие особенности этой зависимости.

1) Величина $\Delta H(\delta)$ меняет знак при некотором δ . В недопированной системе ($\delta = 0$) состояние AF_z с противоположным выстраиванием чередующихся спинов слоев оказывается ниже состояния F_z с одинаковым выстраиванием ($\zeta_d = -1$ или $+1$ в (8) соответственно). При больших δ ситуация обратна вплоть до граничного значения δ_c , при котором исчезает локальная намагниченность и решение переходит в парамагнитное. Отрицательный знак $\Delta H(\delta = 0)$ можно объяснить положительной обменной связью $J_z \sim 2t_z^2/U > 0$. Смена знака ΔH —

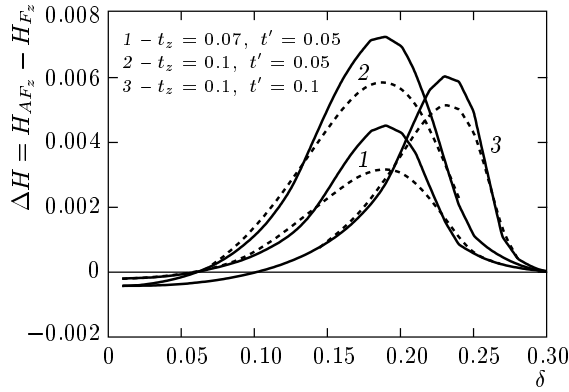


Рис. 1. Зависимость от допирования разности энергий двухслойной системы для двух конфигураций спинового выстраивания. Сплошные кривые относятся к нормальному состоянию, штриховые — к сверхпроводящему состоянию модели с $U/t = 8$. Значения параметров t_z, t' в единицах t указаны на рисунке

результат двухслойного расщепления связывающей и антисвязывающей (по z) зон, в частности расщепления ван-хововской особенности, и, соответственно, разной заселенности их для двух случаев выстраивания спинов.

2) Максимум $\Delta H(\delta)$ отвечает допированию, оптимальному для модели $1L$ одного слоя. При этом допировании $E_{VHS}^{1L} - \mu = 0$. Увеличение t' одновременно сдвигает δ_{opt} и положение максимума на зависимости $\Delta H(\delta)$. Такая связь не случайна. Согласно [27, 31] двухслойное расщепление $\delta\epsilon_z^{(0)} = 2t_z(\cos k_x - \cos k_y)^2/4$ нулевых зон максимально в области $k \sim (\pi, 0)$, формирующей ван-хововскую особенность в плотности состояний. Однако в среднюю энергию расщепление может внести свой вклад, только если на данном участке k связывающая и антисвязывающая зоны окажутся соответственно заселенной и незаселенной. Последнее имеет место при соотношении $E^{1L}(\pi, 0) = E_{VHS}^{1L} = \mu$ для нерасщепленных зонных энергий одного слоя. Остается объяснить, почему вклады двухслойного расщепления в средних энергиях разных конфигураций не совпадают и сохраняются в разности $\Delta H = \bar{H}(AF_z) - \bar{H}(F_z)$. Причина — в разном двухслойном расщеплении для разного выстраивания.

На рис. 2 представлена плотность состояний (density of states, DOS) нижней хаббардовской зоны для двух конфигураций спинового выстраивания для системы с малыми t', t_z при $\delta \sim 0.2$. Представленная $DOS(E)$ сглажена с помощью гауссовской функции с дисперсией $\delta E = 0.02t$. Двухслойное

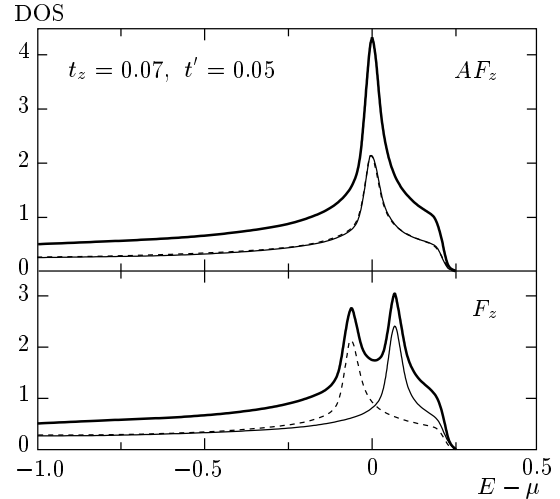


Рис. 2. Плотность состояний для двух типов (AF_z и F_z) спинового выстраивания для модели с малыми t_z, t' . Тонкие сплошная и штриховая кривые относятся к вкладам в DOS от связывающей и антисвязывающей зон. Энергия, отсчитанная от химического потенциала, дана в единицах t

расщепление отсутствует для AF_z -выстраивания, но четко прослеживается для F_z -конфигураций. Это полностью отвечает расщеплению (17), вытекающему из структуры состояний нижней хаббардовской зоны.

Различное поведение плотности состояний отражается непосредственно на поведении фазовых кривых $T_c(\delta)$ сверхпроводящего перехода. На рис. 3 даны примеры $T_c(\delta)$, рассчитанные по формуле (42) для двух моделей. Для AF_z -конфигурации имеем кривую с одним максимумом в отличие от случая F_z -выстраивания, для которого два максимума на кривой $T_c(\delta)$ отвечают двум пикам в плотности состояний. Для F_z -конфигурации имеется лишь решение с симметрией $\zeta_w = 1$ аномального порядка в (8). Для AF_z -выстраивания решения уравнения (П.9) существуют для двух симметрий $\zeta_w = \pm 1$ в (8). Однако решения с $\zeta_w = -1$ дают меньшие T_c^{max} и исчезают при увеличении параметров t', t_z . Поэтому ниже мы обсуждаем лишь сверхпроводящие состояния с симметрией $\zeta_w = 1$ аномальных средних (8).

Отметим характерные свойства моделей с малыми $t', t_z \lesssim 0.1$.

1) Относительно большие $T_c^{max} \approx 0.02t \approx 116$ К при $t = 0.5$ эВ (в отличие от [23] в рассмотрение не включено взаимодействие $V > 0$ соседних узлов, подавляющее T_c).

2) Очень малая разница энергий для двух кон-

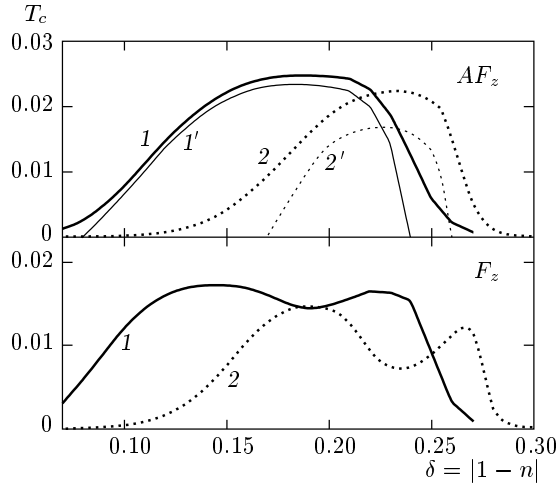


Рис. 3. Температура сверхпроводящего перехода как функция допирования для моделей с параметрами $U = 8$, и $t' = 0.05$, $t_z = 0.07$ (кривые 1) либо $t' = 0.1$, $t_z = 0.1$ (кривые 2, 2') для F_z - и AF_z -конфигураций спинового выстраивания. Кривые 1, 2 либо 1', 2' относятся к решениям с разной симметрией ($\zeta_w = \pm 1$ в (8)) аномальных средних двух слоев (для F_z -конфигурации только один тип симметрии выживает). Все величины T_c, t', t_z даны в единицах t

фигураций выстраивания, $|\Delta H| < kT_c^{max}$.

3) В нормальном состоянии при $\delta \sim \delta_{opt}$ нижней по энергии является F_z -конфигурация спинового выстраивания.

4) Энергия конденсации в наших моделях мала (ее порядок виден на рис. 1).

5) Двухслойное расщепление зон имеет место для F_z -выстраивания, но отсутствует или подавлено для AF_z -конфигурации.

Последнее свойство по физике близко к явлению блокировки межслойного туннелирования в результате внутрислойного рассеяния [36, 37]. В применении к двум конкретным конфигурациям спинового выстраивания это свойство должно проявляться в туннельных спектрах системы. На рис. 4 представлен рассчитанный для двух температур по формуле (П.13) одночастичного приближения дифференциальный туннельный ток как функция приложенного напряжения для модели $t_z = t' = 0.05t$ при допировании, близком к оптимальному допированию однослойной системы. Помимо пиков на границах сверхпроводящей щели при $eV = \pm \Delta_{sc}$ спектр отражает и ван-хововскую особенность нормального состояния. В частности, для F_z -выстраивания при низких температурах видны два пика, отвечающие двухслой-

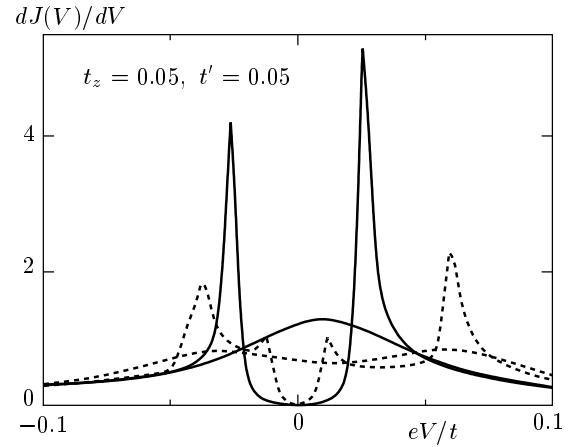


Рис. 4. Дифференциальные туннельные спектры (уравнение (П.10)), при $n = 0.8$ для двух конфигураций спинового выстраивания: AF_z — сплошные кривые, F_z — штриховые. Кривые с резкими и размытыми максимумами относятся соответственно к температурам $T = 0.002t$ и $T = 0.023t$ ниже и выше T_c

ному расщеплению ван-хововской особенности. При $T > T_c$ они сохраняются на графиках в размытом виде. При $\delta \sim \delta_{opt}^{1L}$ пики, отвечающие ван-хововской особенности, симметричны относительно $V = 0$ и напоминают проявление псевдощели в туннельных спектрах. Однако при отклонении δ от δ_{opt}^{1L} симметрия теряется. Результаты расчета не позволяют связать псевдощель нормального состояния купратов с двухслойным расщеплением ввиду разной их зависимости от допирования.

В отличие от нормального состояния для сверхпроводящего состояния предсказание нижней спиновой конфигурации при $\delta \sim \delta_{opt}$ на основе данных расчетов трудно считать однозначным. Дело в том, что оценки энергии конденсации $\sim \kappa_{11} w_1^2$ и скачка теплоемкости дают значения, заниженные примерно в 5 раз по сравнению с наблюдаемыми в YBCO [38]. Поэтому обсудим вопрос о спиновой конфигурации в сверхпроводящем состоянии, основываясь на поведении наблюдаемого двухслойного расщепления при сверхпроводящем переходе в BSCCO [1, 2]. В [2] наблюдаемое двухслойное расщепление в BSCCO при $k \sim (0, \pi)$ уменьшается от величины $\Delta\epsilon(0, \pi) = 80$ мэВ в нормальном состоянии до значения $\delta\epsilon \sim 20$ мэВ в сверхпроводящем состоянии. В свете эффектов, полученных выше для однородных решений, возможны различные объяснения такого поведения. Если предположить, что нижняя по энергии F_z -конфигурация сохраняется

как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях, то снижение $\Delta\epsilon$ при сверхпроводящем переходе соответствует ожидаемому согласно оценке (16). Однако при таком выстраивании уменьшение плотности состояний вследствие расщепления зоны приводит к относительно малым T_c и двум пикам на фазовой кривой. В другом варианте поведение $\Delta\epsilon$ при сверхпроводящем переходе можно было бы объяснить сменой спинового выстраивания при переходе в сверхпроводящее состояние. Не исключено, что сам сверхпроводящий переход инициируется изменением конфигурации $F_z \rightarrow AF_z$ при понижении температуры, так как такой переход сопровождается увеличением плотности состояний на границе Ферми.

Для моделей с большими t', t_z характер зависимости от допирования разности энергий $\Delta H(\delta)$ для двух типов выстраивания сохраняется. С ростом t_z растет величина $|\Delta H|$, как видно на рис. 5. Увеличение t' сдвигает положение F_z - AF_z -кроссовера в область большего допирования. Расчеты подтверждают, что локальная намагниченность $d_{\gamma 0} \neq 0$ каждого слоя сохраняется в решениях в значительной области допирования $\delta \lesssim 0.3$ и для моделей с большими значениями $t_z, t' \approx 0.1-0.3$. Величина d_0 на порядок превышает величину антиферромагнитной спиновой плотности, измеренной в сверхпроводящем состоянии YBCO с помощью упругого рассеяния нейтронов. Различие, возможно, связано с разбросом направлений (или знаков) спиновых моментов разных двухслойных плоскостей кристалла. Значительное уменьшение T_c^{max} и деформация фазовых кривых с увеличением t', t_z связана с уменьшением плотности состояний на границе Ферми для этих моделей. При больших t_z более сложный профиль зонной энергии на границе магнитной зоны Бриллюэна приводит к двухслойному расщеплению ван-хововской особенности не только для F_z -, но и для AF_z -конфигурации, хотя в последнем случае оно меньше (см. рис. 6).

4. ВОЗМОЖНОЕ ВЛИЯНИЕ СПИНОВОГО ВЫСТРАИВАНИЯ НА СПЕКТР МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Поиск связи спинового выстраивания и спектра магнитных возбуждений представляет интерес в связи с обнаружением резонанса в нейтронном рассеянии двухслойных купратов в сверхпроводящем состоянии и необычной его дисперсии [11-16].

Одна из широко обсуждаемых гипотез [39, 40]

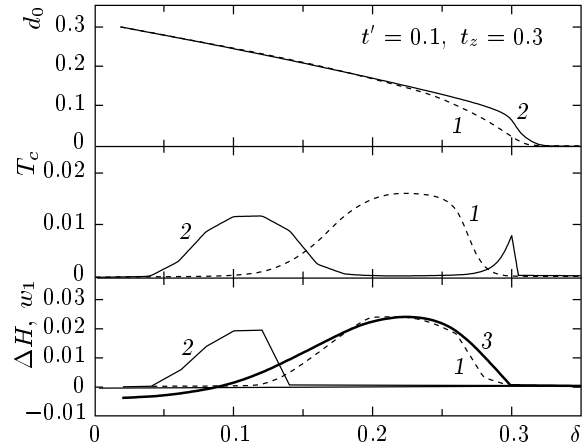


Рис. 5. Зависимости от допирования локальной намагниченности $d_0(\delta)$ (вверху), $T_c(\delta)$ (в середине) и величины $w_1(\delta)$ аномального параметра порядка (внизу) для конфигураций AF_z и F_z (кривые 1 и 2 соответственно). Кривая 3 внизу отвечает разности энергий этих конфигураций. Величины $T_c, t_z, t', \Delta H$ указаны в единицах t

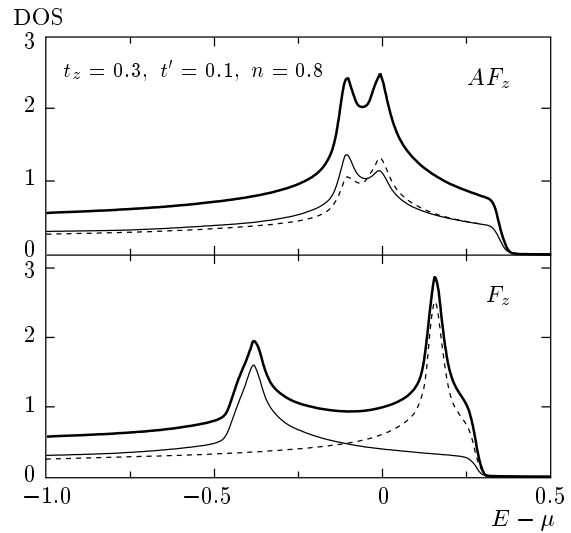


Рис. 6. Плотности состояний для двух конфигураций для моделей с большим $t_z/t = 0.3$ при $n = 0.8$. Тонкие сплошные и штриховые кривые отвечают вкладам в DOS от связывающей и антисвязывающей зон двухслойной системы

связывает его происхождение с так называемым π -резонансом — возбуждением $e-e$ -пары с $q \sim Q = (\pi, \pi)$ в триплетном состоянии

$$O_{Q, \mu=1}^\dagger = \sum_p (\cos k_x - \cos k_y) c_{k+Q, \uparrow}^\dagger c_{-k, \uparrow}^\dagger$$

Самая простая (в RPA-подходе) аргументация гипо-

тезы вытекает из связи такого возбуждения со спиновыми возбуждениями и d -волновым аномальным средним w :

$$\langle [O_{Q,\mu}^\dagger, S_{Q,-\mu}] \rangle \sim w_1.$$

Но тогда интегральный (по ω) вес резонанса порядка w_1^2/d_0 должен более чем на порядок отличаться от интегральной интенсивности

$$I_q \sim \langle [S_{q+Q,\mu}, S_{-q,-\mu}] \rangle \sim d_0$$

поперечных спиновых волн, поскольку для отношения аномального и спинового параметров порядка имеем $w/d_0 \sim 0.1-0.2$. Объяснение спиновых возбуждений и несоизмеримых пиков в восприимчивости $\chi''(q, \omega)$ свойствами поверхности Ферми (см., например, [41]) также не соответствует большой интегральной интенсивности и тому, что при допировании она лишь плавно меняется по сравнению с аналогичной характеристикой недопированного диэлектрика, у которого отсутствует поверхность Ферми. Наиболее правдоподобной является гипотеза об общем магнитном происхождении как несоизмеримых аномалий в $\chi''(q, \omega)$, так и резонанса [42]. Оно связывается с наличием антиферромагнитных доменов, т. е. несоизмеримой модуляции локального чередующегося спина [42]. Существование страйп-структуры получило подтверждение в LaSrCuO [43] и не исключается и для двухслойных купратов. При приложении данной гипотезы к двухслойным купратам остается необъясненным тот факт, что резонанс возникает только в сверхпроводящем состоянии и только в нечетном канале. В двухслойных купратах, помимо влияния несоизмеримых структур, обязателен и важен учет эффектов влияния относительного спинового выстраивания на спектр магнитных возбуждений.

Данный раздел посвящен эффектам влияния спинового выстраивания на спектр магнитных возбуждений для простейших однородных состояний двухслойной системы.

Рассмотрим феноменологический спиновый гамильтониан, описывающий двухслойную модель $\{S_a, S_b\}$:

$$H = \sum_{\gamma=0,1} J_0 \sum_{\langle nm \rangle} \mathbf{S}_n^\gamma \mathbf{S}_m^\gamma + V_{ab}, \quad (18)$$

$$V_{ab} = J_{ab} \sum_{n,\gamma} \mathbf{S}_n^\gamma \mathbf{S}_n^{1-\gamma}. \quad (19)$$

Индекс $\gamma = 0, 1$ отвечает слоям a, b . Предполагаем,

что однородное основное состояние характеризуется спиновой плотностью

$$\langle \mathbf{S}_n^\gamma \rangle = (\zeta_d)^\gamma \mathbf{e}_z (-1)^n d_0, \quad \gamma = 0, 1, \quad (20)$$

с определенным выстраиванием ($\zeta_d = 1$ или $\zeta_d = -1$), стабилизируемым неспиновыми взаимодействиями. Поперечные восприимчивости в четном и нечетном каналах

$$\chi_\mu^{even(odd)}(q, \omega) = i \int_0^\infty e^{i\omega t} \sum_{\gamma, \gamma'} (\pm 1)^{\gamma+\gamma'} \times \\ \times \langle \langle S_{\mu q}^\gamma(t) | (S_{\mu q}^{\gamma'})^\dagger \rangle \rangle dt \quad (21)$$

вычислим в РРА-приближении на основе линейной теории спиновых волн [44]. В (21) $S_\mu = S_x + \mu i S_y$, $\mu = \pm 1$, $\langle \langle A|B \rangle \rangle = \langle [A, B] \rangle$ и знаки \pm относятся соответственно к четной и нечетной компонентам. Четность (even/odd) определена по отношению к перестановке слоев.

Линеаризуя уравнения движения для компонент спинов $S_{\mu q}^\gamma(t)$, получим

$$\text{Im}[\chi^\nu(q, \omega)] = I^\nu(q) [\delta(\omega - \omega_q^\nu) - \delta(\omega + \omega_q^\nu)], \quad (22)$$

где $\nu = even, odd$. Для частот поперечных спиновых возбуждений при F_z - (AF_z -) выстраивании, $\zeta_d = \pm 1$, получаем

$$F_z : \quad \omega^{even}(q) = \Omega \sqrt{\varphi \tilde{\varphi}}, \\ \omega^{odd}(q) = \Omega \sqrt{(\varphi - g)(\tilde{\varphi} - g)}, \quad (23)$$

$$AF_z : \quad \omega^{even}(q) = \Omega \sqrt{(\varphi + g)\tilde{\varphi}}, \\ \omega^{odd}(q) = \Omega \sqrt{\varphi(\tilde{\varphi} + g)}. \quad (24)$$

Здесь

$$\varphi = 2 + \cos q_x + \cos q_y, \\ \tilde{\varphi} = 2 - \cos q_x - \cos q_y, \quad (25) \\ g = J_{ab}/J_0, \quad \Omega = 2J_0 d_0;$$

q относится к полной зоне Бриллюэна, так что самые интенсивные пики возбуждений в $\chi''(q, \omega)$ при $q \rightarrow Q = (\pi, \pi)$ отвечают бесщелевым ветвям возбуждений $\omega_q = c|q - Q|$.

Выражение (25) повторяет с точностью до множителя результат, полученный в [45] для двухслойной системы из спин-волновой теории. В отличие от [45], здесь, как и в линейной теории [43] и в зонном РРА-расчете $\chi(q, \omega)$ [21, 28, 29], частоты и интенсивности спиновых флуктуаций пропорциональны величине чередующейся спиновой плотности d_0 .

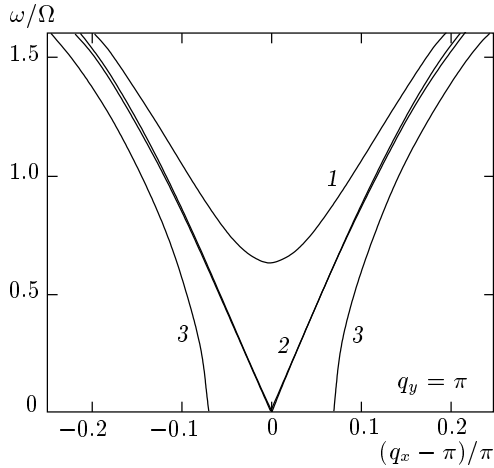


Рис. 7. Ветви магнитных возбуждений $\omega(q)$ двухслойной системы для двух спиновых конфигураций модели с $g = J_{ab}/J_0 = 0.1$. Кривые 1, 2 относятся к $\omega^{even(odd)}$ для AF_z -конфигурации; кривые 2, 3 — к $\omega^{even(odd)}$ для F_z -выстраивания. При $g = -0.1 < 0$ те же кривые 1, 2 либо 2, 3 отвечают каналам $\omega^{odd(even)}$

Дисперсии частот (23), (24) представлены на рис. 7. При $J_{ab} > 0$ для недопированных систем с AF_z -выстраиванием спиновая щель $\Delta = 4d_0\sqrt{J_0J_{ab}}$ открывается в четной, оптической ветви возбуждений. При обратном знаке, $J_{ab} < 0$, частоты возбуждений для F_z - и AF_z -конфигураций меняются местами вместе с заменой каналов возбуждения $even \leftrightarrow odd$.

Допирование отвечает уменьшению d_0 , а следовательно, уменьшению как скорости спиновых волн, так и спиновой щели в четном канале до тех пор, пока речь идет об основной AF_z -конфигурации выстраивания. Такое поведение вполне соответствует наблюдаемому уменьшению спиновой щели в слабодопированном $YBa_2Cu_3O_{6.25}$. Однородные системы со значительным допированием и низшей F_z -конфигурацией имеют бесщелевые возбуждения при $|q - Q| = \sqrt{2g}$, но не при дискретных несоизмеримых значениях квазиимпульса, как наблюдается в $YBCO$, $BSCCO$ [13, 14].

Более низкая энергия F_z -конфигурации означает отрицательный вклад в эффективную константу обменного взаимодействия J_{ab} . Поэтому для примера рассмотрим более общее спиновое взаимодействие V_{ab} между слоями, например, введя анизотропию, т. е. разные константы межслойного взаимодействия

для продольных и поперечных компонент:

$$V_{ab} = \sum_n \{J_{z,ab}S_{zn}^aS_{zn}^b + J_{\perp,ab}(S_{xn}^aS_{xn}^b + S_{yn}^aS_{yn}^b)\}. \quad (26)$$

Направление z в «спиновой» системе координат выделено вектором локального чередующегося спина каждого слоя $\langle \mathbf{S}_n^\gamma \rangle = \mathbf{e}_z(\zeta_d)^\gamma d_0$, $\gamma = 0, 1$ для слоев a, b .

В случае F_z -выстраивания частоты $\omega(q)$ и интенсивности $I(q)$ восприимчивости (22) равны

$$\omega^{even}(q) = \Omega\sqrt{(\varphi - g_1)(\tilde{\varphi} - g_1)}, \quad (27)$$

$$I^{even}(q) = I_0\sqrt{(\tilde{\varphi} - g_1)/(\varphi - g_1)},$$

$$\omega^{odd}(q) = \Omega\sqrt{(\varphi - g_2)(\tilde{\varphi} - g_2)}, \quad (28)$$

$$I^{odd}(q) = I_0\sqrt{(\tilde{\varphi} - g_2)/(\varphi - g_2)}.$$

Аналогичные величины в случае AF_z -выстраивания равны

$$\omega^{even}(q) = \Omega\sqrt{(\varphi + g_2)(\tilde{\varphi} + g_1)}, \quad (29)$$

$$I^{even}(q) = I_0\sqrt{(\tilde{\varphi} + g_1)/(\varphi + g_2)},$$

$$\omega^{odd}(q) = \Omega\sqrt{(\varphi + g_1)(\tilde{\varphi} + g_2)}, \quad (30)$$

$$I^{odd}(q) = I_0\sqrt{(\tilde{\varphi} + g_2)/(\varphi + g_1)}.$$

Здесь Ω и функции $\varphi = \varphi(q)$, $\tilde{\varphi} = \varphi(q + Q)$ определены соотношениями (25); величины $g_{1(2)}$, I_0 равны

$$g_{1(2)} = \frac{J_{z,ab} \mp J_{\perp,ab}}{2J_0}, \quad I_0 = 2\pi d_0. \quad (31)$$

При $g_2 > g_1 > 0$ и AF_z -выстраивании в двух — четном и нечетном — каналах открываются спиновые щели:

$$\Delta^{even(odd)} = 2\Omega\sqrt{g_{2(1)}}. \quad (32)$$

Таким образом, для AF_z -конфигурации низкочастотные спиновые возбуждения с $\omega < \Delta^{odd} < \Delta^{even}$ отсутствуют. В то же время для F_z -конфигурации при тех же соотношениях $g_2 > g_1 > 0$ спектр возбуждений носит бесщелевой характер. Однако низкочастотные пики характеризуются относительно малой интенсивностью и начинаются с несоизмеримых квазиимпульсов

$$|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| > \delta q^\nu, \quad \delta q^{even(odd)} = \sqrt{2g_{1(2)}}. \quad (33)$$

На рис. 8 представлена дисперсия спиновых возбуждений в четном и нечетном каналах для двух типов выстраивания для модели с $g_1 = 0.05$, $g_2 = 0.15$.

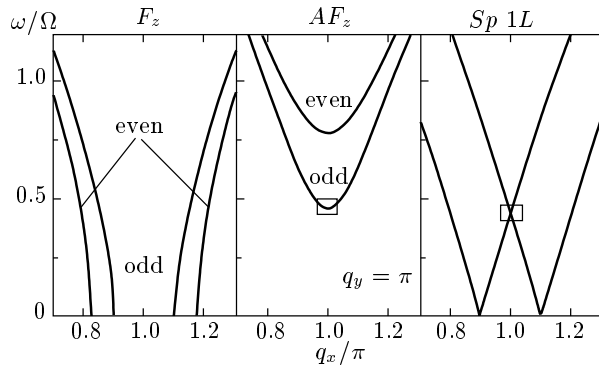


Рис. 8. Графики F_z и AF_z демонстрируют изменение спектров магнитных возбуждений при смене спиновой конфигурации, $F_z \rightarrow AF_z$, для модели с анизотропным межслойным взаимодействием (22) при значениях параметров $g_1 = 0.05$, $g_2 = 0.15$. Справа — схематичное изображение ветвей возбуждений в случае спиральной (Sp) или модулированной несоизмеримой спиновой структуры основного состояния с $Q_\eta = (\pi(1 - \eta), \pi)$, $\eta = 0.1$. Квадратом отмечены предполагаемые частоты резонанса в интерпретации на базе однородных решений двухслойной модели (в центре) или интерпретации [42] на базе модулированной структуры однослойной модели

Если, согласно высказанной выше гипотезе, сверхпроводящий переход совершается одновременно с перестройкой $F_z \rightarrow AF_z$ спиновой конфигурации, то в нечетном канале (χ^{odd}) появляется интенсивный пик при $q \sim (\pi, \pi)$ на частоте $\omega = \Delta^{odd} = 2\Omega\sqrt{g_1}$. Этот пик отсутствовал в F_z -конфигурации, которая, согласно нашему предположению, является основной конфигурацией при $T > T_c$. Данная однородная модель не описывает пики восприимчивости $\chi''(q, \omega \rightarrow 0)$ при дискретных несоизмеримых значениях квазиимпульсов $Q_\eta = (\pi(1 + \eta), \pi)$, наблюдаемые в YBCO, BSCCO [12, 14] и указывающие на наличие несоизмеримых структур. Обобщение рассмотрения на такого рода структуры необходимо. Справа на рис. 8 схематично представлены ветви спиновых возбуждений для спиральных состояний [28, 29] и состояний с модуляцией локального спина $\langle S_{zn} \rangle = d_0 \cos \mathbf{Q}_\eta \mathbf{n}$ [42] однослойных (1L) моделей. В [42] частота резонанса отождествлялась с частотой $\omega(Q)$, отвечающей пересечению ветвей при $Q = (\pi, \pi)$. Но в такой картине неясно, как появление резонанса связано со сверхпроводящим переходом и почему резонанс наблюдается только в нечетном канале.

5. ВЫВОДЫ

1. В моделях с внутрислойным механизмом сверхпроводящего спаривания максимальная температура сверхпроводящего перехода T_c^{max} для однородных решений двухслойной системы не превышает T_c^{max} для аналогичных решений однослойной системы. Это не соответствует наблюдаемому различию T_c^{max} в купратах. Возможно, неоднородности типа страйп-структур в однослойных купратах подавляют T_c .

2. Подтверждено сохранение локальной намагниченности d_0 в значительной области допирования для широкого диапазона параметров t', t_z . Величина d_0 на порядок превышает величину антиферромагнитной спиновой плотности, измеренной в сверхпроводящем состоянии YBCO с помощью упругого рассеяния нейтронов. Различие, возможно, связано с разбросом направлений (или знаков) спиновых моментов разных двухслойных плоскостей кристалла.

3. Обнаружен кроссовер двух конфигураций спиновой системы при изменении допирования. Нижнее при малых δ состояние с AF_z -выстраиванием сменяется нижним состоянием с F_z -выстраиванием чередующихся локальных спинов слоев при больших δ . Максимум в разности энергий этих конфигураций отвечает оптимальному допированию однослойной системы и связан с максимальным в этом случае расщеплением ван-хововских особенностей. Малая разница энергий двух конфигураций предполагает возможность сильного влияния на спиновое выстраивание температуры и, возможно, конденсации пар.

4. Двухслойное расщепление зон $\delta\epsilon(k)$ и, в частности, расщепление ван-хововской особенности в плотности состояний отсутствует при AF_z -, но четко выражено при F_z -выстраивании локальных спинов слоев.

5. Наблюдаемое в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ большое двухслойное расщепление в нормальном состоянии и малое в сверхпроводящем состоянии [2], согласно нашим моделям, могут указывать на перестройку конфигурации спинового выстраивания, $F_z \rightarrow AF_z$, в ходе или одновременно со сверхпроводящим переходом. Дальнейшие исследования необходимы для выяснения вопроса — может ли такая перестройка или перестройка более сложных спиновых структур страйп-типа объяснить появление магнитного резонанса в нейтронном рассеянии в сверхпроводящем состоянии двухслойных купратов.

6. Показано, что спектр магнитных возбуждений резко зависит от типа спинового выстраивания. Дан пример спиновой модели, для которой смена

конфигурации $F_z \rightarrow AF_z$ приводит к появлению в нечетном канале резонанса (щели спиновых возбуждений) в χ^{odd} при $q = (\pi, \pi)$.

Одна из ближайших задач — распространение расчетов спектра магнитных возбуждений на неоднородные спиновые структуры двухслойных систем страйп-типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 00-03-32981 и 00-15-97334). Авторы благодарны В. Я. Кривову за стимулирующие обсуждения проблемы и П. Фюльде за предоставленную возможность работы в Институте физики комплексных систем Макса Планка.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Средняя энергия (6) для гамильтониана (1) в результате преобразования (5) представляется в виде

$$\bar{H}(y_\nu, z) = \sum_\gamma \bar{H}_\gamma(r_{\gamma l}, d_{\gamma l}, w_\gamma) + t_z z. \quad (\text{П.1})$$

Здесь $H_\gamma(y_{\gamma\nu})$ — вклады от каждого слоя $\gamma = 0, 1$, последний член — вклад от перескоков между слоями. Величины $z, y_{\gamma\nu} = \{r_{\gamma l}, d_{\gamma l}, w_\gamma\}$ определены формулами (7). Выражения для $\bar{H}_\gamma(y_{\gamma\nu})$ для однослойной модели Хаббарда были найдены ранее [1, 2].

Матрицы $h_{ij}(k)$ восьмого порядка, определяющие линеаризованный гамильтониан (9) в базисе операторов (11), равны

$$h_{ij} = \begin{pmatrix} A_1 & h_z \\ h_z^\dagger & A_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{П.2})$$

$$(h_z)_{ll'} = t_z \varphi^2(k) \delta_{ll'} \{1, 1, -1, -1\}_l, \quad (\text{П.3})$$

$$l, l' = 1, \dots, 4.$$

Блоки четвертого порядка A_γ относятся к каждому из слоев $\gamma = 0, 1$. Выражения для них через соответствующие производные $\partial \bar{H}_\gamma / \partial y_{\gamma\nu}$ приводились ранее [23].

Диагонализация матрицы (П.2)

$$h_{ij} U_{j,\lambda} = U_{j,\lambda} E_{k\lambda}, \quad i, j, \lambda = 1, \dots, 8, \quad (\text{П.4})$$

для каждого k дает энергии $E_{k\lambda}$ и собственные операторы в базисе (11)

$$\chi_{k\lambda}^\dagger = \sum_j b_{kj}^\dagger U_{j,\lambda}. \quad (\text{П.5})$$

Знание их позволяет вычислить набор средних $\{y_{\gamma\nu}, z\}$ согласно уравнениям

$$y_{\gamma\nu} = \frac{1}{N} \sum_k^F g_\nu [\theta_{\gamma\nu}]_{ij} U_{i\lambda}^* U_{j\lambda} f_\lambda, \quad (\text{П.6})$$

$$z = \frac{1}{N} \sum_k^F g_z [\theta_z]_{ij} U_{i\lambda}^* U_{j\lambda} f_\lambda,$$

$$\theta_{\gamma\nu} = \begin{pmatrix} \theta_\nu^{00} & 0 \\ 0 & \theta_\nu^{11} \end{pmatrix}, \quad \theta_z = \begin{pmatrix} 0 & \theta_z^{01} \\ \theta_z^{10} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{П.7})$$

В формуле (П.6) $f_\lambda = f(E_{k\lambda})$ — фермиевские функции. Весовые функции $g_\nu(k)$ и структура матриц следуют из определений (7) величин $y_{\gamma\nu}$. В (П.6), (П.7) функции $g_\nu(k)$ для $r_{\gamma\nu}, d_{\gamma\nu}$ и 4×4 -блоки θ_ν^{ij} те же, что приводились ранее для однослойной системы. Величина z определяется согласно формулам (П.6), (П.7), в которых

$$g_z(k) = \frac{1}{4} (\cos k_x - \cos k_y)^2, \quad (\text{П.8})$$

$$(\theta_z^{01})_{ll'} = (\theta_z^{10})_{l'l} = \delta_{ll'} \{1, 1, -1, -1\}_l.$$

Уравнение для T_c при вычислении фазовых кривых выводится путем разложения при $w_\gamma \rightarrow 0$ правой и левой частей уравнения для w_γ из уравнений (П.6). Таким образом, для двух типов симметрии сверхпроводящего порядка двухслойной системы $w_{\gamma=1} = \zeta_w w_{\gamma=0}$, $\zeta_w = \pm 1$. В результате имеем следующие уравнения для T_c :

$$1 = \kappa (r_{\gamma l} d_{\gamma l}) \times \frac{1}{N} \sum_k^F \sum_{\lambda, \lambda'} |U_{i\lambda}^* \theta_{ij}^w U_{j\lambda}|^2 \frac{f_\lambda - f_{\lambda'}}{E_\lambda - E_{\lambda'}} \varphi_1^2(k). \quad (\text{П.9})$$

Здесь $f_\lambda = f(E_{k\lambda})$ — фермиевские функции; $E_\lambda, U_{i\lambda}$ определяются решением линейной задачи (П.4) для данного k ; $\varphi_1(k) = \cos k_x - \cos k_y$. Матрица 8-го порядка θ^w зависит от симметрии сверхпроводящего порядка, $\zeta_w = \pm 1$ в (8), и равна

$$\theta_{ij}^w = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \zeta_w \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{П.10})$$

Константа спаривания κ в (П.9) для эффективного гамильтониана (5) равна

$$\kappa = \frac{1}{4} \sum_\gamma \frac{\partial^2 \bar{H}_\gamma}{\partial w_\gamma^2}. \quad (\text{П.11})$$

Основной отрицательный вклад в κ дает величина, приведенная в формуле (13). Приведем формулы

для расчета тока в одночастичном приближении в так называемом $S-I-N$ -контакте, типичном для измерений с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Полный туннельный ток $J(V) = e(W_I - W_{II})$ определяется вероятностями $W_{I(II)}$ перехода электрона из сверхпроводника в металл и обратно. Туннельное взаимодействие между состояниями металла ($d_{\epsilon\sigma}$) и внешним слоем (скажем, слоем $\gamma = 1$) двухслойного сверхпроводника моделируем как

$$V_{tun} = \sum_{\sigma,n} F(k)(c_{1,k,\sigma}^\dagger d_{\epsilon\sigma} + \text{H.c.}). \quad (\text{II.12})$$

Тогда дифференциальный туннельный ток как функция приложенной разности потенциалов eV равен

$$\frac{dI(V)}{dV} = -\frac{1}{N} \sum_k^F \{ [U_{1\lambda}^2 R + U_{2\lambda}^2 \tilde{R}] f'(E_{k\lambda} - eV) + [U_{3\lambda}^2 R + U_{4\lambda}^2 \tilde{R}] f'(E_{k\lambda} + eV) \}. \quad (\text{II.13})$$

Здесь $R = F^2(k)$, $\tilde{R} = F^2(\tilde{k})$; $f'(E) = df/dE$ — производная ферми-функции, $U_{i\lambda}$, $E_{k\lambda}$ определяют решения линейной задачи (II.4) в базисе операторов (11). В качестве формфактора бралась та же зависимость $F(k) = \varphi_1^2(k)$, что и для двухслойного расщепления в (2).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y.-D. Chuan, A. D. Gromko, A. Fedorov et al., E-print archives, cond-mat/0102386.
2. D. L. Feng, N. P. Armitage, D. H. Lu et al., E-print archives, cond-mat/0102385.
3. J. Mesot, M. Boehm, M. R. Norman et al., E-print archives, cond-mat/0102339.
4. S. Chakravarty, S. Sudbo, P. W. Anderson, and S. Strong, *Science* **261**, 337 (1993); P. W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in High- T_c Cuprates*, Princeton University Press, Princeton, New-Jersey (1997).
5. H. M. Fretwell, A. Kaminski, J. Mesot et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4449 (2000).
6. S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Lenger et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4453 (2000).
7. J. Mesot et al., E-print archives, cond-mat/9910430.
8. N. L. Saini, J. Avila, A. Bioconi et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3467 (1997).
9. Y.-D. Chuang, A. D. Gromko, D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3717 (1999).
10. P. V. Bogdanov, A. Lanzara, X. J. Zhou et al., E-print archives, cond-mat/0005394.
11. J. N. Tranquada, G. Shirane, B. Keimer et al., *Phys. Rev. B* **40**, 4503 (1989).
12. P. Bourges, in *The Gap Symmetry and Fluctuations in High Temperature Superconductors*, ed. by J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna, and S. A. Wolf, Plenum Press.
13. P. Bourges, Y. Sidis, H. F. Fong et al., *Science* **288**, 1234 (2000).
14. H. A. Mook, P. Dai, F. Dogan, R. D. Hunt et al., *Nature* **404**, 729 (2000).
15. P. Dai, H. A. Mook, R. D. Hunt et al., *Phys. Rev. B* **63**, 54525 (2001).
16. P. Dai, H. A. Mook, S. M. Hayden et al., E-print archives, cond-mat/0001249.
17. A. Rigamonti, F. Borza, and P. Carett, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 1367 (1998).
18. Ch. Niedermayer, C. Bernhard, T. Blasius et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3843 (1998).
19. H. A. Mook, P. Dai, F. Dogan, R. D. Hunt et al., E-print archives, cond-mat/0102047.
20. Y. Sidis, C. Ulrich, P. Bourges et al., E-print archives, cond-mat/0101095; *Phys. Rev. Lett.* **86** 4105 (2001).
21. J. R. Schrieffer, X. G. Wen, F. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**, 11663 (1989).
22. U. Trapper, D. Ihle, and H. Fenke, *Phys. Rev. B* **52**, 11553 (1995).
23. A. A. Ovchinnikov and M. Ya. Ovchinnikova, *Phys. Lett. A* **249**, 531 (1998); А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 350 (1998); *ЖЭТФ* **114**, 985 (1998); **115**, 649 (1999); **120**, 175 (2001).
24. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, P. Horsch, and A. J. Liechtenstein, *Phys. Rev. B* **55**, 11997 (1997).
25. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, *Phys. Rev. B* **58**, 6194 (1998).
26. F. Onufrieva, P. Pfeuty, and M. Kisilev, *Phys. Rev. Lett. B* **82**, 2370 (1999).
27. A. I. Liechtenstein, O. Gunnarsson, O. K. Andersen, and R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **54**, 12505 (1996).

28. A. V. Chubukov and K. A. Mussaelian, *Phys. Rev. B* **51**, 12605 (1995).
29. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова *ЖЭТФ* **116**, 1058 (1999).
30. B. I. Schraiman and E. D. Siggia, *Phys. Rev. B* **40**, 9162 (1989).
31. O. K. Andersen, O. Jepsen, A. I. Liechtenstein, and I. I. Mazin, *Phys. Rev. B* **49**, 4145 (1994).
32. D. L. Novikov and A. J. Freeman, *Physica C* **212**, 273 (1993).
33. J. E. Hirsh, *Phys. Rev. B* **39**, 11515 (1989); E-print archives, cond-mat/0106310.
34. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, *Phys. Rev. B* **45**, 7959 (1992).
35. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, *Phys. Rev. B* **45**, 7588 (1992).
36. N. Kumar, T. P. Pareek, and A. M. Jayannavar, *Phys. Rev. B* **57**, 13399 (1998).
37. S. Chakravarty and P. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3859 (1994).
38. D. M. Gizberg, in *Physical Properties of High Temperature Superconductors*, ed. by D. M. Gizberg, World Scientific, Singapore (1989).
39. E. Demler and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4126 (1995).
40. O. Tchernyshyov, M. R. Norman, and A. V. Chubukov, E-print archives, cond-mat/0009072.
41. A. A. Abrikosov, *Phys. Rev. B* **62**, 15156 (2000).
42. C. D. Batista, G. Ortiz, and A. V. Balatsky, E-print archives, cond-mat/0008345.
43. R. J. McQueeney, J. L. Sarrao, P. G. Pagliouso et al., E-print archives, cond-mat/0104118.
44. T. Ziman and P.-A. Lindgard, *Phys. Rev. B* **33**, 1976 (1986).
45. D. Reznik, P. Bourges, L. P. Regnault et al., *Phys. Rev. B* **53**, 14741 (1996).