

ОБРАЗОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО МОМЕНТА ВБЛИЗИ ВАКАНСИИ В СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ

С.А.Кривенко, Г.Г.Халиуллин

Казанский физико-технический институт РАН
420029 Казань, Россия¹⁾

Поступила в редакцию 22 сентября 1995 г.

Одиночная вакансия в спиновой жидкости, находящейся в потоковой (flux) фазе, порождает локализованное состояние со свободным спином. Эффект может объяснить появление локальных моментов в ВТСП системах при немагнитном допировании.

Изучение примесных эффектов в различных сильнокоррелированных электронных системах дает важную информацию о структуре их основного состояния. В данной работе исследуются эффекты немагнитного замещения (вакансии) в двумерной спиновой жидкости. Последняя описывается в рамках двух среднеполевых моделей резонирующих валентных связей (RVB) – однородной RVB [1], и flux-фазы [2, 3]. Эти модели широко эксплуатируются при описании спиновых свойств ВТСП систем. Предполагая, что статическая вакансия на RVB-решетке может служить моделью немагнитного замещения медных ионов в ВТСП системах, мы обсудим, в каких именно RVB-состояниях подобное допирование приводит к образованию локализованного состояния. Экспериментально возникновение локализованных моментов вблизи немагнитных примесей в ВТСП материалах было убедительно продемонстрировано непосредственным наблюдением магнитного резонанса на этих моментах [4, 5]. Как обсуждалось в работах [4, 5], этот эффект тесно связан также с проблемой аномального влияния немагнитных дефектов на ВТСП. Представленные в настоящей работе расчеты показывают, что вакансия в RVB-решетке действительно порождает локализованное состояние, если спиновая жидкость находится в flux-фазе. Возникающий свободный спин 1/2 приводит к кюриподобному вкладу в восприимчивость. Плотность связанного состояния распределена по узлам решетки вблизи вакансии и спадает с расстоянием от нее как $\sim R^{-2}$.

1. Модель. RVB-состояния с фермиевскими спиновыми возбуждениями (спинонами) соответствуют, в частности, среднеполевым решениям антиферромагнитной модели Гейзенберга. Представляя спиновые операторы через псевдофермионы, $s_i = c_{i\alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta} c_{i\beta} / 2$, и факторизуя обменное взаимодействие в канале частица – дырка, имеем

$$H_{RVB} = - \sum_{\langle ij \rangle} (\Delta_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1)$$

где суммирование проводится по ближайшим связям. Спектр фермионов определяется выбором фазы параметров связи $\Delta_{i; i+\delta} = \langle c_{i+\delta}^+ c_i \rangle_{\sigma}$. Здесь δ означает направление ближайшего узла; на квадратной решетке $\delta = (x, -x, y, -y)$. В однородной RVB-фазе $\Delta_{ij} = \text{const}$, тогда спиновый спектр $\xi_{\mathbf{k}} = (D/2)(\cos k_x + \cos k_y)$ является бесщелевым.

¹⁾e-mail: khaliu@ksc.iasnet.com

Флюкс-фаза на квадратной решетке [2] соответствует параметризации $\Delta_\delta = -\Delta_{-\delta}$, $\Delta_x = i\Delta_y$. В этом случае гамильтониан (1) диагонализуется преобразованием

$$c_{R \in A} = \left(\frac{1}{N}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}R)(c_{1\mathbf{k}} + c_{2\mathbf{k}}), \quad (2)$$

$$c_{R \in B} = \left(\frac{1}{N}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}R + i\varphi_{\mathbf{k}})(c_{1\mathbf{k}} - c_{2\mathbf{k}}),$$

где подрешетка $A(B)$ состоит из узлов с четным (нечетным) значением $R_x + R_y$, N – число узлов, а суммирование по импульсу \mathbf{k} ведется по магнитной зоне Бриллюэна. Фазовый фактор $\exp(i\varphi_{\mathbf{k}}) = \Delta_{\mathbf{k}}^*/|\Delta_{\mathbf{k}}|$, $\Delta_{\mathbf{k}} = 2\Delta(\cos k_x + i \cos k_y)$. Спектр флюкс-фазы состоит из двух ветвей:

$$H_{RVB} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} (-c_{1\mathbf{k}}^+ c_{1\mathbf{k}} + c_{2\mathbf{k}}^+ c_{2\mathbf{k}})_\sigma, \quad (3)$$

$$\xi_{\mathbf{k}} = 2\Delta(\cos^2 k_x + \cos^2 k_y)^{1/2}.$$

При малых энергиях плотность спиновых состояний определяется окрестностью нулей $\xi_{\mathbf{k}}$ в точках $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ и имеет место псевдощелевой характер: $\rho_0(\omega) = 2|\omega|/\pi D^2$, где $D = 4\Delta/\sqrt{2}$ – полуширина зоны.

Нас интересует модификация основного состояния RVB-решетки при появлении в ней одного дефекта в узле $R = 0$ – спиновой вакансии. Отсутствия псевдофермионов в вакантном узле, а вместе с ними и спина в нем, можно добиться, добавив в (1) и (3) локальный хипотенциал λ_0 :

$$H = H_{RVB} + \lambda_0(n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow}), \quad (4)$$

$$n_\sigma = c_\sigma^+ c_\sigma = (c_1 + c_2)_\sigma^+ (c_1 + c_2)_\sigma / 2.$$

Гамильтониан (4) не содержит взаимодействия и легко анализируется; взятие предела $\lambda_0 \rightarrow \infty$ в расчетах имитирует немагнитное замещение.

2. Локализация спинона. Вычислим плотность состояний в флюкс-фазе с вакансией. Определим спиновые температурные функции Грина $g_{nm}(\epsilon; \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle -T_\tau c_{n\mathbf{k}}(\tau) c_{m\mathbf{k}'}^+(0) \rangle_\epsilon$; индексы n, m обозначают номер подзоны, а спиновый индекс здесь и далее опускаем. При усреднении по состояниям гамильтониана (4) для них получим следующее выражение:

$$g_{nm}(\epsilon; \mathbf{k}, \mathbf{k}') = g_{nn}^0(\epsilon; \mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{nm} + g_{nn}^0(\epsilon; \mathbf{k}) T(\epsilon) g_{mm}^0(\epsilon; \mathbf{k}'), \quad (5)$$

где $g_{nn}^0(\epsilon; \mathbf{k}) = \{i\epsilon - (-1)^n \xi_{\mathbf{k}}\}^{-1} \delta_{nm}$ – пропагаторы в отсутствие вакансии. При $\lambda_0 \rightarrow \infty$ выражение для T -матрицы рассеяния спинов на вакансии имеет вид

$$T(\epsilon) = -\frac{1}{NG^0(\epsilon)}, \quad (6)$$

где

$$G^0(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{kn} g_{nn}^0(\epsilon; \mathbf{k}) \quad (7)$$

есть одноузловая гриновская функция нулевого приближения исходных c -фермионов. Вследствие псевдощели в спектре флюкс-фазы функция (7) при малых ϵ стремится к нулю как

$$G^0(\epsilon) = -i(4\epsilon/\pi D^2) \ln(\pi D/4|\epsilon|). \quad (8)$$

Соответственно, T -матрица (6) имеет полюс при $\omega = 0$, что означает появление связанного состояния, которое пиннировано на уровне Ферми. Наличие локализованного состояния спинона проявляется как сингулярная поправка к плотности состояний $\rho(\omega)$. Она определяется функцией

$$G(\epsilon) = \sum_{kn} g_{nn}(\epsilon; \mathbf{k}, \mathbf{k}) = NG^0(\epsilon) + \delta G(\epsilon), \quad (9)$$

где поправка, связанная с наличием вакансии, оказывается равной

$$\delta G(\epsilon) = -i \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln G^0(\epsilon) = \frac{1}{i\epsilon} \left(1 - \frac{1}{\ln(D/|\epsilon|)} \right). \quad (10)$$

Результат (10), из которого следует $\delta\rho(\omega) = \delta(\omega)$, свидетельствует об индуцировании вакансии локального момента. Это приводит к появлению кюриподобного вклада в однородную спиновую восприимчивость, в чем можно убедиться непосредственным вычислением.

В однородной RVB-фазе, как легко увидеть, подобная локализация спинона отсутствует. Формально в этой фазе затравочная плотность состояний, даваемая (7), при малых энергиях не стремится к нулю, и вблизи уровня Ферми T -матрица является регулярной функцией.

Проведя расчет в рамках $s + id$ -фазы [3] с вакансией, можно опять прийти к результату (10). Это естественно, так как обе формулировки флюкс-фазы эквивалентны [6] благодаря $SU(2)$ -симметрии. В терминах $s + id$ -формулировки спиноны из разных узлов образуют синглетные пары с d -симметрией. Качественно, удаление спинона в вакантном узле превращает его партнера из конденсата в свободный спин. Ситуация по-существу аналогична образованию локального момента вблизи кондо-дырки в наполовину заполненных кондо-изоляторах [7], когда удаление одного f -центра приводит к локализации его партнера из зоны проводимости. Чисто формально, теория флюкс-фазы в $s + id$ -формулировке [3] эквивалентна БКШ-теории d -симметрии. То, что немагнитная примесь в унитарном пределе индуцирует примесные состояния в анизотропных сверхпроводниках, известно давно [8, 9], и это обстоятельство часто привлекается сейчас при обсуждении влияния примесей на сверхпроводящие свойства ВТСП систем. Наше рассмотрение, возможно, означает, что низкоэнергетические примесные состояния в ВТСП системах, вероятно, в значительной степени имеют чисто спиновое происхождение. Подчеркнем также, что образование локального момента вблизи статической вакансии в квантовом антиферромагнетике обнаруживается также в численных расчетах [10].

3. Распределение локального момента. Представление о пространственном распределении примесного состояния можно получить, вычислив функцию Грина $G(\epsilon; \mathbf{R}, \mathbf{R}) = \langle -T_\tau c_{\mathbf{R}}(\tau) c_{\mathbf{R}}^\dagger(0) \rangle_\epsilon$ исходных c -псевдофермионов. Поправка к

ней, связанная с наличием вакансии, имеет вид

$$\delta G = |A(\epsilon, \mathbf{R})|^2 / G^0(\epsilon), \quad \mathbf{R} \in A, \quad (11)$$

$$\delta G = -|B(\epsilon, \mathbf{R})|^2 / G^0(\epsilon), \quad \mathbf{R} \in B,$$

где

$$A(\epsilon, \mathbf{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_n} g_{n\mathbf{n}}^0(\epsilon; \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}), \quad (12)$$

$$B(\epsilon, \mathbf{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_n} g_{n\mathbf{n}}^0(\epsilon; \mathbf{k}) (-1)^{n+1} \exp(-i\varphi_{\mathbf{k}} + i\mathbf{k}\mathbf{R}).$$

Вычислив (11), можно обнаружить, что сингулярная часть плотности состояний распределяется только по узлам подрешетки B , как и ожидалось из физических соображений (напомним, что удаленный спин принадлежал подрешетке A). Вблизи вакансии поправка к $\rho(\omega)$ при малых частотах ($R\omega/D \ll 1$) ведет себя как

$$\delta\rho_B(\omega, \mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{R}) \frac{2}{\pi R^2} \frac{\delta(\omega)}{\ln(\pi D/4|\omega|)}. \quad (13)$$

Величина (13) имеет сложную угловую зависимость, определяемую функцией $\Phi(\mathbf{R}) = 1/2 - \cos 2\theta(\cos \pi R_x - \cos \pi R_y)/4$ (здесь θ – угол между осью x и вектором \mathbf{R}), и спадает с увеличением расстояния от вакансии как R^{-2} . Заметим, что сумма $\delta\rho(\omega, \mathbf{R})$ по всей решетке дает полученный выше результат $\delta\rho = \delta(\omega)$.

Таким образом, немагнитное замещение в флюкс-фазе индуцирует локальный момент. Если это имеет определенное отношение к образованию локальных моментов вблизи немагнитных примесей в ВТСП системах, то это бы означало присутствие эффектов спаривания в спиновых степенях свободы уже в нормальной фазе этих систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-02-02578).

-
1. G.Baskaran, Z.Zou, and P.W.Anderson, *Solid. State Commun.* **63**, 973 (1987).
 2. I.Affleck and J.Marston, *Phys. Rev. B* **37**, 3774 (1988).
 3. G.Kotliar, *Phys. Rev. B* **37**, 3664 (1988).
 4. В.Е.Катаев, Е.Ф.Куковицкий, Г.Б.Тейтельбаум, А.М.Финкельштейн, *Письма в ЖЭТФ* **51**, 115 (1990).
 5. A.M.Finkel'stein, V.E.Kataev, E.F.Kukovitskii, and G.B.Teitel'baum, *Physica C* **168**, 370 (1990).
 6. I.Affleck, Z.Zou, T.Hsu, and P.W.Anderson, *Phys. Rev. B* **38**, 745 (1988).
 7. P.Schlottmann, *Phys. Rev. B* **46**, 998 (1992).
 8. P.Hirschfeld, D.Vollhardt, and P.Wolfe, *Solid State Commun.* **59**, 111 (1986).
 9. S.Schmitt-Rink, K.Miyake, and C.M.Varma, *Phys. Rev. B* **57**, 2275 (1986).
 10. D.Poilblanc, D.J.Scalapino, and W.Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 884 (1994).