

На правах рукописи

Федосеев Александр Дмитриевич

**ТЕПЛОЕМКОСТЬ И КИНЕТИЧЕСКИЕ
КОЭФФИЦИЕНТЫ СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ
МОТТ-ХАББАРДОВСКИХ СИСТЕМ**

01.04.07 — физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск — 2012

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор **Вальков Валерий Владимирович**

Официальные оппоненты: **Михеенков Андрей Витальевич**
доктор физико-математических наук, доцент
(ФБГУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф.Верецагина Российской академии наук)
Гавричков Владимир Александрович
кандидат физико-математических наук,
(ФБГУН Институт физики им.Л.В.Киренского Сибирского отделения Российской академии наук)

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова"

Защита состоится _____ декабря 2012 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 003.055.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок 50, стр. 38, ИФ СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН.

Автореферат разослан _____ ноября 2012 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Известно, что свойства нормальной фазы соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, проявляющего высокотемпературную сверхпроводимость [1], демонстрируют ряд необычных особенностей. Кристаллографическая анизотропия и слоистость данного соединения проявляется в его транспортных и термодинамических характеристиках. Кроме того, реализация антиферромагнитного упорядочения в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ при низкой концентрации дырок в CuO_2 плоскостях сказывается на его низкотемпературных свойствах.

Ранее было показано, что в проводящих антиферромагнетиках возможен эффект отрицательного магнитосопротивления [2], который связывается с образованием ферромагнитных капель вследствие s-d обменного взаимодействия. С ростом величины магнитного поля увеличивается интенсивность туннелирования электронов между каплями, что и приводит к росту проводимости антиферромагнетика.

Механизм отрицательного магнитосопротивления может иметь и иную природу. В системах с относительно малой величиной антиферромагнитного обменного взаимодействия в магнитных полях происходит скос магнитных подрешеток. В результате этого имеет место модификация энергетического спектра подвижных носителей заряда и изменение магнитных и транспортных свойств проводящего антиферромагнетика в скошенной фазе. В частности в работе [3] было показано влияние скоса магнитных подрешеток на эффект де Гааза-ван Альфена в полуметалле.

Экспериментальное изучение свойств купратов и композитных соединений привели к постановке задач теоретического исследования свойств квазидвумерных антиферромагнитных систем. Так в слоистых соединениях наличие антиферромагнитного упорядочения, конкурирующего со сверхпроводящим, может быть связано с количеством плоскостей в элементарной ячейке [4]. Исследования композитных материалов, состоящих из антиферромагнитных слоев, разделенных парамагнитными слоями, показали зависимость температуры Нееля от количества близко расположенных магнитных слоев [5]. Наличие двух слоев в элементарной ячейке $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ также сказывается на магнитной восприимчивости и спектре магнонов [6]. Теоретическое описание свойств слоистых магнетиков на сегодняшний день составляет одно из центральных направлений физики конденсированного состояния. В значительной степени это связано с возможностью практического использования эффектов, основанных на взаимосвязи магнитных и транспортных свойств.

Целью данной работы является теоретическое исследование природы формирования особенностей низкотемпературной теплоемкости $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, магнитосопротивления двумерных антиферромагнетиков, развитие спин-волновой теории двухслойных квазидвумерных антиферромагнетиков и вывод аналитического выражения для температуры Нееля таких систем.

Для достижения поставленной цели требовалось решить следующие **задачи**:

1. Исследовать влияния скоса магнитных подрешеток, возникающего в магнитном поле, на проводящие свойства двумерного антиферромагнетика с поверхностью Ферми, характерной для недодопированных соединений $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$.
2. В рамках спин-волновой теории изучить влияние двухслойности квазидвумерного антиферромагнетика на температуру Нееля и низкотемпературную теплоемкость.
3. Выяснить природу формирования шоттковских центров и их энергетическую структуру в недодопированных соединениях $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. Рассчитать низкотемпературное поведение теплоемкости недодопированных монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ при различных значениях магнитного поля.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Развитие теории скошенной фазы слабелегированного двумерного антиферромагнетика и предсказание эффекта отрицательного магнитосопротивления, а также нахождение условий реализации перехода диэлектрик-полуметалл.
2. Построение спин-волновой теории двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика. Вывод аналитического выражения для температуры Нееля, описывающего зависимость этой величины от обменных параметров, характеризующих двухслойность квазидвумерного антиферромагнетика.
3. Теоретический анализ влияния магнитного поля на низкотемпературную теплоемкость двухслойных квазидвумерных антиферромагнетиков.
4. Формулировка механизма образования шоттковских центров в CuO_x -цепочках, позволяющего описать низкую интенсивность шоттковской аномалии в теплоемкости соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ и модификацию этой аномалии в магнитном поле в области низких температур.

Научная новизна и практическая значимость:

Показано, что скос магнитных подрешеток в двумерном слаболегированном антиферромагнетике с поверхностью Ферми, соответствующей недодопированным соединениям $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ вызывает эффект отрицательного магнитосопротивления. Приложение сильных магнитных полей, меньших поля спин-флоп перехода, приводит к квантовому фазовому переходу диэлектрик-полуметалл. При этом концентрация фермионов растет линейно с увеличением поля в полуметаллической фазе.

Для двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика в рамках спин-волновой теории в приближении Тябликова рассчитан спектр магнитных возбуждений. Впервые для двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика получено аналитическое выражение для температуры Нееля. Показано, что эффективный обменный параметр, характеризующий двумерность обменных магнитных взаимодействий, формируется в виде среднего геометрического двух межплоскостных обменных параметров. Получено выражение для ренормировки низкотемпературной теплоемкости двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика во внешнем магнитном поле.

Предложена модель формирования шоттковских центров, позволяющая описать особенности низкотемпературной теплоемкости недодопированных соединений $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, наблюдаемых в магнитном поле.

Полученные в ходе диссертационного исследования аналитические выражения удобны для интерпретации экспериментальных данных и получения дополнительных сведений об энергетических параметрах антиферромагнитных и систем с подвижными вакансиями.

Достоверность полученных результатов определяется корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений и их апробированностью при исследованиях других авторов, а так же правильностью предельных переходов к известным результатам.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на: XXXIII Международной зимней школе физиков-теоретиков "Коуровка" (Россия, Новоуральск, 2010), 13-м международном симпозиуме "Порядок, беспорядок и свойства оксидов" (Россия, г. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2010), Конференция молодых ученых СО РАН (Россия, Красноярск, 2011), 1-м международном симпозиуме "Физика межфазных границы и фазовые переходы" (Россия, г. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2011), 14-м международном симпозиуме "Упорядочение в минералах и сплавах" (Россия, г. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2011), 4-й международной конференции "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости"

мости"(Россия, г.Звенигород, 2011), XXXIV Международной школе физиков-теоретиков "Коуровка", а также дважды на заседании секции "Магнетизм" Научного совета РАН по физике конденсированного состояния (Россия, Москва, 2010, 2011).

Диссертационная работа была выполнена при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая физика конденсированных сред"; Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы"; Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН #53; Российского фонда фундаментальных исследований (грант #10-02-00251, р_сибирь #11-02-98007); гранта Президента РФ МК-1300.2011.2.

Личный вклад. Автор принимал активное участие в обсуждении и постановке задач, проводил аналитические и численные вычисления, обсуждал полученные результаты, занимался подготовкой статей и тезисов, докладывал и обсуждал результаты работы на научных конференциях.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях, из них 3 в рецензируемых журналах из перечня ВАК, 6 — в тезисах докладов и трудах конференций.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации 111 страниц текста с 17 рисунками. Список литературы содержит 96 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, формулируется цель, описывается структура диссертации, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации материалов диссертации.

В **первой главе** приводится краткий обзор экспериментальных работ, направленных на исследование структуры, транспортных и магнитных свойств соединения $YBa_2Cu_3O_{6+x}$, а также теоретических моделей и методов, применяемых в диссертации для описания систем с сильными электронными корреляциями. Описывается уравнение Больцмана и методы его решения. Обсуждаются типы вкладов в низкотемпературную теплоемкость. Проводится обзор работ по исследованию свойств двумерных и квазидвумерных антиферромагнетиков.

Во **второй главе** исследуется влияние скоса магнитных подрешеток на транспортные свойства двумерного антиферромагнетика.

Антиферромагнетик рассматривается как твердое тело, в узлах кристаллической решетки которого находятся атомы с отличным от нуля спиновым моментом. В дальнейшем эта подсистема рассматривается как подсистема локализованных спиновых моментов. Вторую подсистему твердого тела образуют коллективизированные электроны. При этом между локализованными спиновыми моментами реализуется обменное взаимодействие, приводящее к антиферромагнитному порядку и разбиению решетки на две магнитные подрешетки. Между локализованными и коллективизированными электронами существует обменное взаимодействие, которое влияет на энергетический спектр электронов и транспортные свойства антиферромагнитной системы.

Гамильтониан антиферромагнетика записывается в виде суммы четырех слагаемых:

$$H = T + H_{sd} + H_{dd} + H_h, \quad (1)$$

где $T = \sum_{ll'\sigma} t_{ll'} a_{l\sigma}^+ a_{l'\sigma}$ - оператор кинетической энергии коллективизированных электронов в представлении Ванье,

$H_{sd} = J \sum_l \vec{S}_l \vec{\sigma}_l$ - оператор s-d обменного взаимодействия,

$H_{dd} = \sum_{ll'} I_{ll'} \vec{S}_l \vec{S}_{l'}$ - оператор обменного взаимодействия между локализованными электронами,

$H_h = -2\mu_B H \sum_l (S_l^z + \sigma_l^z)$ - оператор, отражающий энергию зеемановского взаимодействия локализованных и коллективизированных электронов с внешним магнитным полем, ориентированным вдоль оси Oz.

При учете s-d обменного взаимодействия и взаимодействия между локализованными спиновыми моментами в рамках среднеполевого приближения энергетический спектр коллективизированной подсистемы электронов антиферромагнетика записывается в виде [3]:

$$E_{k\sigma}^{\pm} = t_k \pm \sqrt{(-\Gamma_k + \sigma(JS \cos \theta - 2\mu_B H))^2 + (JS \sin \theta)^2/4}, \quad (2)$$

где

$$\Gamma_k = 4t_1 \cos(k_x/2) \cos(k_y/2), \quad t_k = 2t_2 (\cos k_x + \cos k_y) + 4t_3 \cos(2k_x) \cos(2k_y)$$

- фурье-образы интегралов перескока, квазиимпульс k принимает значения из магнитной зоны Бриллюэна, а угол θ , характеризующий скос магнитных

подрешеток, находится из уравнения самосогласования:

$$\begin{aligned}
& -2S^2 K_0 \sin 2\theta + 4\mu_B H S \sin \theta - \\
& -2JS \sin \theta \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \frac{\mu_B H - 2\sigma\Gamma_k}{4D_\sigma} (f_{k\sigma}^- - f_{k\sigma}^+) = 0, \quad (3) \\
& D_\sigma = \sqrt{(-\Gamma_k + \sigma(JS \cos \theta - 2\mu_B H))^2 + (JS \sin \theta)^2/4}.
\end{aligned}$$

В этом уравнении последнее слагаемое учитывает влияние коллективизированной подсистемы на локализованную.

Решение данного уравнения численно для широкого диапазона параметра J и концентрации электронов $n \sim 1$ в расчете на один узел решетки показало, что учет обратного влияния коллективизированной подсистемы на локализованную имеет количественный, а не качественный характер и сводится к уменьшению величины скоса подрешеток в магнитном поле:

$$\cos \theta = \frac{\alpha\mu_B H}{K_0 S}, \quad H < SK_0/\alpha\mu_B; \quad \theta = 0, \quad H > K_0 S/\alpha\mu_B,$$

где $\alpha < 1$ параметр ренормировки, получаемый из численного решения уравнения самосогласования (3). При этом чем меньше величина s-d обменного взаимодействия J и чем больше величина локализованного спинового момента S , тем меньше эффект обратного влияния. Так для случая $K_0 = 0.01|t_1|$, $J = 0.1|t_1|$, $S = 1/2$, $\alpha \approx 0.75$, а для $J = 0.05|t_1|$, $S = 1$, $\alpha \approx 0.9$.

В диссертации исследуется случай слаболегированных антиферромагнетиков (под слабым легированием имеется ввиду концентрация электронов $n \sim 1$, $n < 1$ в расчете на один узел), у которых ферми-поверхности находятся в окрестности точек $(0, \pm\pi)$, $(\pm\pi, 0)$ в магнитной зоне Бриллюэна ($(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ в немагнитной, что соответствует ARPES данным для случая недодопированных YBCO [7]). Для соответствия этим данным необходимо наложить следующие условия на введенные параметры:

$$t_2 > 2t_3, \quad 16t_1^2 + (JS/2)^2 > (4t_2 + 8t_3 + JS/2)^2.$$

В рассматриваемой модели диэлектрической фазе будет соответствовать ситуация, когда нижняя зона заполнена полностью, а верхняя полностью пустая [8]. Это означает отсутствие легирования. При этом никаких носителей тока в системе нет. С точки зрения зонной структуры такая ситуация будет реализовываться в том случае, когда нет перекрытия верхней и нижней антиферромагнитных подзон при $H = 0$. Математически данное условие выглядит следующим образом:

$$2t_2 < JS/2 + 4t_3.$$

Выражение для проводимости слаболегированного квазидвумерного антиферромагнетика находится из решения уравнения Больцмана в приближении времени релаксации и в отсутствии магнитного поля имеет простой вид:

$$\sigma = \frac{e^2 \tau n_h}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right), \quad \frac{\hbar^2}{2m_1 b^2} = \left(\frac{4t_1^2}{JS} - t_2 - 2t_3 \right), \quad \frac{\hbar^2}{2m_2 b^2} = (t_2 - 2t_3). \quad (4)$$

Здесь n_h - концентрация дырок в плоскости, b - параметр магнитной элементарной ячейки. Выражение для константы Холла в пределе $H \rightarrow 0$:

$$R_H = -\frac{1}{c e n_h} \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}.$$

Полученный результат отличается от привычного результата $R_H = (cqn)^{-1}$ для материала с носителями заряда q с концентрацией n тем, что в него входит отношение эффективных масс, ввиду локальной анизотропии контуров Ферми.

Влияние слабого магнитного поля на спектр фермионных возбуждений слаболегированного антиферромагнетика сводится к ренормировке одной из эффективных масс:

$$m_1(H) = \frac{\hbar^2 JS}{8b^2 t_1^2} \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha \mu_B H}{K_0 S} \right)^2}. \quad (5)$$

Подстановка ренормировки эффективной массы (5) в выражение для проводимости (4), с точностью до второго порядка по величине магнитного поля приводит к выражению для магнитосопротивления двумерного антиферромагнетика в слабых полях:

$$\sigma(H) = \sigma(0) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha \mu_B H}{K_0 S} \right)^2 \right]. \quad (6)$$

Ренормировка эффективной массы сказывается и на константе Зомерфельда:

$$C_{mol}(H, T) = \gamma(H)T, \quad \gamma(H) \approx \gamma(0) \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha \mu_B H}{K_0 S} \right)^2 \right], \quad (7)$$

$$\gamma(0) = \frac{\pi^2}{6} \sqrt{\frac{JS}{t_2 - 2t_3}} \frac{N_a k_B^2}{|t_1|}.$$

При переходе в антиферромагнитную фазу, зона Бриллюэна уменьшается вдвое, а закон дисперсии электронов модифицируется, а закон дисперсии электронов модифицируется и возникает щель [9].

При увеличении магнитного поля из-за скоса магнитных подрешеток ширина щели между энергетическими зонами будет уменьшаться вплоть до полного исчезновения при критической величине магнитного поля H_{cr} . При этом нелегированный антиферромагнетик перейдет из диэлектрического состояния в полуметаллическое. Существенно, что величина поля, при котором происходит переход диэлектрик-полуметалл, меньше, чем величина магнитного поля, в котором происходит спин-флоп переход и сверхструктура исчезает полностью:

$$h_{cr} = \sqrt{1 - \left(\frac{4(t_2 - 2t_3)}{JS} \right)^2}, \quad h = \frac{\alpha \mu_B H}{K_0 S}. \quad (8)$$

Концентрация фермионов в полуметаллическом состоянии растет линейно с увеличением магнитного поля в окрестности точки фазового перехода:

$$n_h = n_e = \frac{4\pi JS h_{cr}}{|t_1| \sqrt{1 - h_{cr}^2}} (h - h_{cr}), \quad h > h_{cr}. \quad (9)$$

В **третьей главе** на основе гамильтониана Гейзенберга исследуется влияние двухслойности на свойства квазидвумерного антиферромагнетика.

Для отражения квазидвумерности и двухслойности системы вводится индекс, нумерующий спин, как совокупность двумерной компоненты, отвечающей суммированию по ионам в пределах одной плоскости, и одномерной, нумерующей элементарные ячейки вдоль оси c , перпендикулярной к плоскостям. Для наглядности гамильтониан, описывающий двухслойную магнитную подсистему записан в виде

$$H_{exch} = H_{in} + H_{ext}, \quad (10)$$

где первый оператор H_{in} описывает совокупность невзаимодействующих между собой двумерных спиновых подсистем с гейзенберговским обменным взаимодействием:

$$H_{in} = \sum_n \sum_{\alpha=1}^2 \left[\sum_{fg} J_{fg} \left(\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{gn\alpha} \right) - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} \left(\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{f'n\alpha} \right) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} \left(\vec{S}_{gn\alpha} \vec{S}_{g'n\alpha} \right) \right],$$

а H_{ext} учитывает обменные связи между спиновыми моментами, находящи-

мися в разных плоскостях:

$$\begin{aligned}
 H_{ext}^{(1)} &= \sum_n \left\{ \sum_{fg} K_{fg} \left[\left(\vec{S}_{fn1} \vec{S}_{gn2} \right) + \left(\vec{S}_{fn2} \vec{S}_{gn1} \right) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{ff'} L_{ff'} \left(\vec{S}_{fn1} \vec{S}_{f'n2} \right) - \sum_{gg'} L_{gg'} \left(\vec{S}_{gn1} \vec{S}_{g'n2} \right) \right\}, \\
 H_{ext}^{(2)} &= \sum_n \left\{ \sum_{fg} K'_{fg} \left[\left(\vec{S}_{fn1} \vec{S}_{g(n-1)2} \right) + \left(\vec{S}_{f(n-1)2} \vec{S}_{gn1} \right) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{ff'} L'_{ff'} \left(\vec{S}_{fn1} \vec{S}_{f'(n-1)2} \right) - \sum_{gg'} L'_{gg'} \left(\vec{S}_{gn1} \vec{S}_{g'(n-1)2} \right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Греческой буквой α обозначается номер плоскости ($\alpha = 1$ либо $\alpha = 2$, латинские буквы $f, f', \dots, g, g', \dots$ пробегает значения, соответствующие положениям спиновых моментов в плоскостях, а дискретная переменная $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ определяет координату элементарной ячейки вдоль оси z , кото-

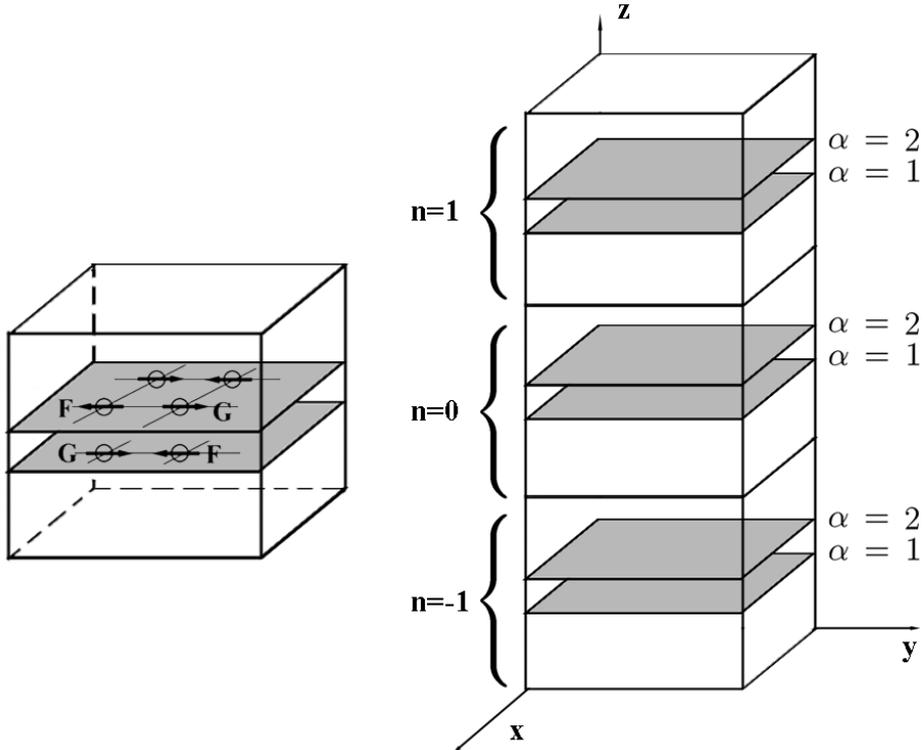


Рис. 1: В правой части рисунка изображено модельное представление трех элементарных ячеек для двухслойной квазидвумерной магнитной подсистемы. Значение α определяет номер плоскости в элементарной ячейке. Слева выделена одна элементарная ячейка и показан тип антиферромагнитного упорядочения.

рая будет совмещена с осью Oz системы координат (рис. 1).

Константы $J_{fg}, I_{gg'}$ и $I_{ff'}$ отвечают внутриплоскостному обменному взаимодействию между спинами принадлежащими разным подрешеткам и одной подрешетке соответственно, $K_{fg}, L_{ff'}, L_{gg'}$ - взаимодействию между ионами в ближайших плоскостях, $K'_{fg}, L'_{ff'}, L'_{gg'}$ - в плоскостях, находящихся в соседних элементарных ячейках. Считается, что константы обменного взаимодействия отвечают антиферромагнитному упорядочению как в плоскостях, так и в направлении, перпендикулярном к плоскостям.

Две ветви энергетического спектра, найденные из уравнений движения для двухвременных запаздывающих функций Грина в приближении Тябликова, определяются выражениями

$$\begin{aligned} E_{1,2}^2(q) &= R^2 \left(\tilde{J}_0^2 + |L_q|^2 - J_q^2 - |K_q|^2 \pm D(q) \right) \\ D(q) &= [4J_q^2 |K_q|^2 - 2|L_q|^2 |K_q|^2 + 4\tilde{J}_0^2 |L_q|^2 + \\ &+ 4\tilde{J}_0 J_q (K_q L_q^* + L_q K_q^*) + K_q^2 L_q^{*2} + L_q^2 K_q^{*2}]^{1/2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь R - антиферромагнитный параметр порядка, а фурье-образы обменных взаимодействий записываются в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{J}_0(q) &= J_0 + I_0 + K_0 + L_0 - I_q \\ I_q &= \sum_{f'} I_{ff'} e^{-iq(R_{fn\alpha} - R_{f'n\alpha})} \\ J_q &= \sum_g J_{fg} e^{-iq(R_{fn\alpha} - R_{gn\alpha})} \\ K_q &= \sum_g K_{fg} e^{-iq(R_{fn1} - R_{gn2})} + \sum_g K'_{fg} e^{-iq(R_{fn1} - R_{g(n-1)2})} \\ L_q &= \sum_{f'} L_{ff'} e^{-iq(R_{fn1} - R_{f'n2})} + \sum_{f'} L'_{fg} e^{-iq(R_{fn1} - R_{f'(n-1)2})} \end{aligned} \quad (12)$$

В дальнейшем рассматривается приближение ближайших соседей, при этом квазиимпульсные зависимости для обменных интегралов (12) принимают вид:

$$\begin{aligned} J_q &= 4J_1 \cos(q_x/2) \cos(q_y/2), \\ K_q &= K e^{-iq_z \delta_\perp} + K' e^{iq_z \delta'_\perp}, \\ |K_q|^2 &= K^2 + K'^2 + 2KK' \cos(q_z), \\ I_q &= 0, \quad L_q = 0, \\ \tilde{J}_0 &= 4J_1 + K + K', \end{aligned} \quad (13)$$

где J_1 - константа обменного взаимодействия между ближайшими спиновыми моментами в одной плоскости, K - в ближайших плоскостях, K' - в бли-

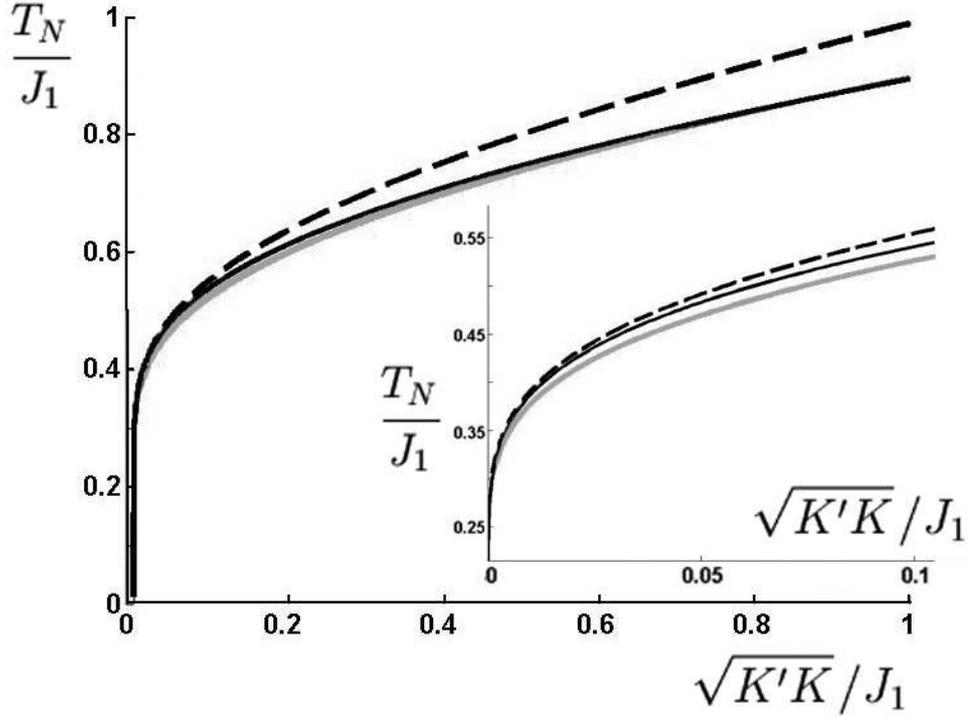


Рис. 2: Зависимость температуры Нееля от отношения $\sqrt{K'K}/J_1$. Штриховая линия соответствует численному решению при $K' = K$, серая - решению при $K' = K/10$, а сплошная черная задается формулой (17).

жайших плоскостях из соседних элементарных ячеек, δ_{\perp} и δ'_{\perp} - расстояние между соответствующими плоскостями (в единицах высоты элементарной ячейки).

В рассматриваемом случае выражение для энергетического спектра сильно упрощается:

$$E_{1,2}(q) = R\sqrt{\tilde{J}_0^2 - (J_q \pm |K_q|)^2}. \quad (14)$$

Уравнение самосогласования для параметра порядка в рассматриваемом приближении ближайших соседей для случая $S = 1/2$ имеет следующий вид:

$$R = \frac{1}{(I_1 + I_2)}, \quad I_j = \frac{4}{N} \sum_q \frac{\tilde{J}_0 R}{E_j} \coth \frac{E_j}{2T}. \quad (15)$$

Это уравнение позволяет записать выражение для температуры Нееля T_N :

$$T_N = \left(2\tilde{J}_0 \frac{4}{N} \sum_q [1/\omega_1^2 + 1/\omega_2^2] \right)^{-1}, \quad \omega_{1,2} = \sqrt{\tilde{J}_0^2 - (J_q \pm |K_q|)^2}. \quad (16)$$

В случае квазидвумерного антиферромагнетика, когда $K', K \ll J_1$ в диссертации получено аналитическое выражения для температуры Нееля двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика:

$$T_N = \frac{\pi J_1}{\ln(J_1/\sqrt{K'K}) + C_1}, \quad (17)$$

где константа $C_1 \approx 3.5$ важна для практических целей. Стоит особо отметить, что константы межплоскостных обменных взаимодействий K и K' входят в логарифмическую зависимость в виде их среднего геометрического.

Для случая соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ параметры $J_1 = 1200\text{K}$, $K = 120\text{K}$ [10], $K' = 10\text{K}$. Это в соответствии с формулой (17) дает значение для температуры Нееля $T_N = 540\text{K}$, что соответствует температуре Нееля этого соединения, полученной в эксперименте.

В дальнейшем рассматривается двухслойный квазидвумерный антиферромагнетик в приближении ближайших соседей, помещенный во внешнее магнитное поле, направленное перпендикулярно к плоскостям. Гамильтониан такого антиферромагнетика записывается в виде:

$$\begin{aligned} H_{afm} &= H_{ex} + H_h \quad (18) \\ H_{ex} &= \sum_{fgn\alpha} J_{fg} \vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{gn\alpha} + \sum_{fgn} K_{fg} \left(\vec{S}_{fn1} \vec{S}_{gn2} + \vec{S}_{fn2} \vec{S}_{gn1} \right) + \\ &\quad + \sum_{fgn} K'_{fg} \left(\vec{S}_{fn2} \vec{S}_{g(n+1)1} + \vec{S}_{fn1} \vec{S}_{g(n-1)2} \right) \\ H_h &= -2\mu_B H \left(\sum_{fn\alpha} S_{fn\alpha}^z + \sum_{gn\alpha} S_{gn\alpha}^z \right) \end{aligned}$$

Приложение магнитного поля в направлении, перпендикулярном направлению спиновых моментов, приводит к скосу магнитных подрешеток:

$$\cos \theta = \mu_B H / S(J_0 + K_0).$$

Энергетический спектр магнонов двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика в магнитном поле представляется в виде четырех ветвей: две ветви соответствуют акустической ветви при нулевом магнитном поле, а оставшиеся - оптической:

$$\begin{aligned} E_{1,2}^2 &= E_{ac}^2 \pm 2S^2 \cos^2 \theta (J_q + |K_q|) (J_0 + K_0 \pm (J_q + |K_q|)), \quad (19) \\ E_{3,4}^2 &= E_{opt}^2 \pm 2S^2 \cos^2 \theta (J_q - |K_q|) (J_0 + K_0 \pm (J_q - |K_q|)), \end{aligned}$$

где для сокращения записи введены обозначения

$$\begin{aligned} E_{ac}^2 &= S^2(J_0 + K_0)^2 - S^2(J_q + |K_q|)^2, \\ E_{opt}^2 &= S^2(J_0 + K_0)^2 - S^2(J_q - |K_q|)^2. \end{aligned}$$

При этом стоит отметить, что одна из акустических ветвей является активационной с щелью, определяемой величиной магнитного поля:

$$\Delta(H) = 2S \cos \theta (J_0 + K_0) = 2\mu_B H.$$

Появление это щели в спектре магнонов приводит к ренормировке низкотемпературной теплоемкости во внешнем поле:

$$C_{sum} \approx \frac{16\pi^2 T^3}{15S^3 (J_0 + K_0)^{3/2} J_0 \sqrt{K'K/K_0}} - \frac{1}{3S^3} \frac{(\mu_B H)^2 T}{(J_0 + K_0)^{3/2} J_0 \sqrt{K'K/K_0}} \quad (20)$$

Из приведенной выше формулы видно, что во внешнем магнитном поле в низкотемпературной теплоемкости двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика возникает отрицательный линейный по температуре вклад $\mu_B H \ll T \ll \sqrt{JK'}$. На него накладывается следующее ограничение

$$C_{mag} = \beta T^3 - \gamma T, \quad \frac{\gamma}{\beta} = \frac{5(\mu_B H)^2}{16\pi^2}.$$

В **четвертой главе** сформулирована модель шоттковских центров, позволяющая описать низкотемпературную теплоемкость недодопированных соединений $YBa_2Cu_3O_{6+x}$.

На рис.3 продемонстрирован сценарий возникновения медь-кислородных комплексов, которые служат источниками аномалии Шоттки. При высокой температуре отжига, когда формируется соединение $YBa_2Cu_3O_6$, в цепочках кислородных ионов нет, а все ионы меди находятся в одновалентном состоянии. Схематически эта ситуация показана строкой а) рис.3. Точки обозначают вакантные кислородные позиции, а крестики - ионы Cu^{1+} . В этом случае никаких шоттковских центров в цепочках нет. При понижении температуры отжига, кислорода занимает вакантные места, что соответствует соединению $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. При малых x ионы кислорода, занимая позиции между двумя ионами меди, формируют трехионные комплексы (Cu-O-Cu) так, что слева и справа от таких комплексов кислородные

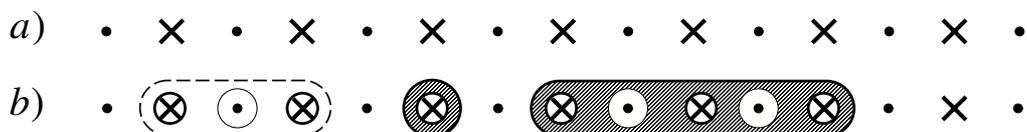


Рис. 3: Формирование центров Шоттки в цепочках.

позиции остаются вакантными (левый незаштрихованный комплекс строки b) рис.3). При формировании химической связи в трехионных комплексах ионы меди становятся двухвалентными и приобретают спиновый момент $s = 1/2$. Возникающий через ион O^{2-} сверхобмен Андерсона [11] приводит к образованию синглетного состояния Cu-O-Cu. Поэтому эти комплексы не участвуют в формировании шоттковской аномалии.

При дальнейшем понижении температуры отжига и увеличении x в цепочках появляются пятиионные комплексы, когда ионы кислорода занимают только две ближайшие друг к другу вакансии (см. правый заштрихованный комплекс цепочки b) рис.3). Концентрация таких комплексов $\sim x^2(1-x)^2$. При учете орбитальных состояний ($l = 2$) полное число энергетических уровней комплекса Cu-O-Cu-O-Cu равно 1000. Однако, из-за нечетного числа ионов меди с $s = 1/2$ такой комплекс способен формировать аномалию Шоттки.

Необходимо отметить, что для формирования пятиионного комплекса с номинальной валентностью ионов требуется дополнительный электрон. Существует две возможности. В первом случае электрон заимствуется из CuO_2 -плоскостей. Это приводит к формированию дырок в этих плоскостях. Второй вариант заключается в том, что недостающий электрон берется из 3d-оболочки одновалентного иона меди. В этом случае формируется уединенный (слева и справа ионы кислорода отсутствуют) Cu^{2+} ион (заштрихованный одноионный комплекс в центре цепочки b) рис.3), обладающий спином $s = 1/2$. Такие изолированные ионы, как нетрудно видеть, также могут выступать в роли шоттковских центров.

Если же в пятиионном комплексе не все ионы будут соответствовать номинальной валентности, то на нем будет присутствовать дырка, движущаяся по комплексу. Поскольку дырка вносит дополнительный спин $s = 1/2$, то в этом случае основному состоянию комплекса будет соответствовать синглет. Следовательно такой комплекс также не будет принимать участие в формировании шоттковской аномалии. Это означает, что только часть пятиионных комплексов будет давать вклад в шоттковскую аномалию. В результате при учете вкладов в интегральную теплоемкость от шоттковских центров необходимо учитывать поправочный коэффициент для концентрации пятиионных комплексов, дающих вклад в аномалию Шоттки. Подчеркнем, что без учета этого эффекта интенсивность вклада шоттковской аномалии получается завышенной, по сравнению с шоттковской аномалией, определяемой из эксперимента.

Двухвалентный ион меди характеризуется наличием спинового $S = 1/2$ и орбитального $L = 2$ моментов. Его энергетическая структура формирует-

ся в результате действия кристаллического поля, спин-орбитального взаимодействия и внешнего магнитного поля. Соответственно этому гамильтониан иона Cu^{2+} , находящегося в узле с номером f может быть записан в виде:

$$H_0(f) = -\frac{K}{2} (l_{fx}^4 + l_{fy}^4 + l_{fz}^4) - \lambda (\mathbf{S}_f \mathbf{l}_f) + \quad (21)$$

$$+ \Delta (l_x^2 - l_y^2) - \mu_B H (2s_{fz} + l_{fz}),$$

где первое слагаемое описывает взаимодействие с кубической компонентой кристаллического поля, второе слагаемое учитывает спин-орбитальное взаимодействие, третье слагаемое отражает влияние орторомбической анизотропии. Последнее слагаемое гамильтониана соответствует учету зеемановской энергии в магнитном поле H .

Для пятиионного комплекса, у которого ионы меди находятся в узлах f_1 , f_2 и f_3 необходимо учесть обменное взаимодействие, возникающее между спиновыми моментами \mathbf{S}_{f_i} этих ионов. Соответственно этому полный гамильтониан комплекса записывается в виде

$$H = \sum_{i=1}^3 H_0(f_i) + I (\mathbf{S}_{f_1} \mathbf{S}_{f_2} + \mathbf{S}_{f_2} \mathbf{S}_{f_3}), \quad (22)$$

где I - интеграл обменного взаимодействия. В рамках этих гамильтонианов находились собственные энергии для одноионного и пятиионного комплексов. Варьирование параметров модели K , λ , Δ позволяет описать модификацию температурной зависимости $C(T)/T$ при включении магнитного поля. Удовлетворительные, результаты получились при выполнении соотношений:

$$\lambda \sim K > 0; \quad \lambda, K \gg \Delta, \mu_B H.$$

Стоит подчеркнуть, что в области промежуточных полей экспериментальные данные наносились на кривые, полученные уже без дополнительной подгонки, т.е. при тех значениях параметров модели, которые были определены для $H = 0$ и $H = 9T$.

Молярная теплоемкость системы шоттковских центров, образуемых уединенными ионами меди, вычисляется по формуле:

$$C_1 = \frac{n_1 N_A}{k_B T^2} \{ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \}, \quad (23)$$

где n_1 - концентрация ионов Cu^{2+} , окруженных вакансиями кислорода (рис.4.1). Входящие в (23) средние находятся по распределению Гиббса ($q = 1, 2$):

$$\langle E^q \rangle = \sum_n (E_n)^q \exp(-E_n/T) / \sum_m \exp(-E_m/T),$$

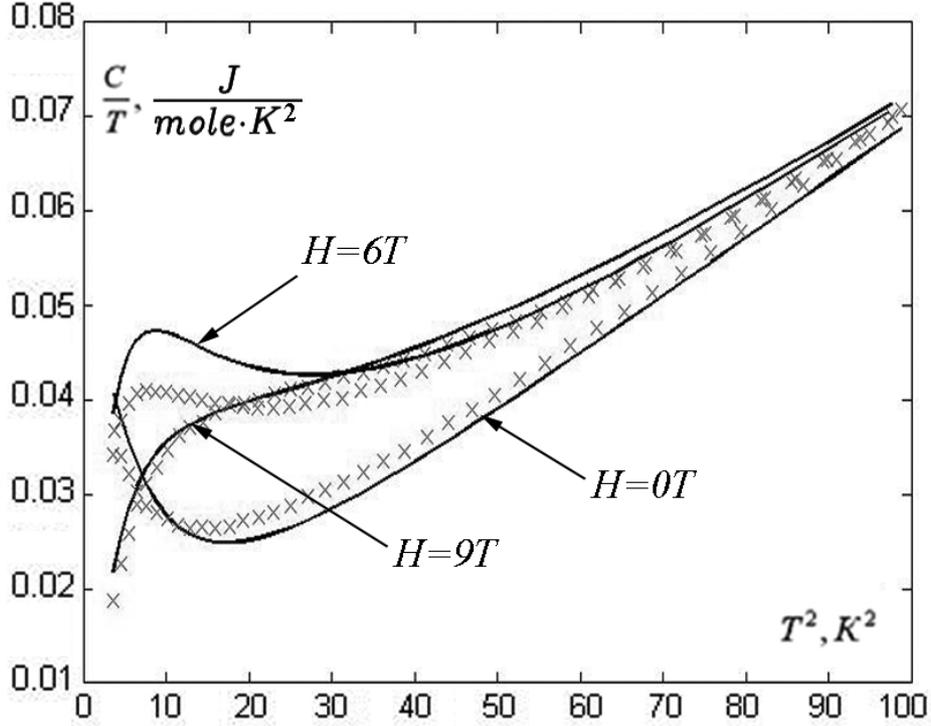


Рис. 4: Низкотемпературное поведение отношения $C(T)/T$ образца $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+0.28}$ при различных значениях магнитного поля. Кресты соответствуют экспериментальным данным, сплошные линии отражают теоретические зависимости $C(T)/T$.

где E_n - собственные энергии гамильтониана (21).

Аналогично этому вычисляется теплоемкость пятиионных комплексов C_5 с концентрацией $n_5 = px^2(1-x)^2/3$ в расчете на одну элементарную ячейку, где p - поправочный коэффициент, возникающий в связи с возможностью нахождения дырки на пятиионных комплексах (см. выше)

$$C_5 = \frac{n_5 N_A}{k_B T^2} \{ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \}. \quad (24)$$

При этом распределение Гиббса определяется на основе 1000 собственных значений энергий гамильтониана (22).

Вклад коллективизированных электронов учитывался в рамках $t - J$ модели. При этом наиболее важный вклад во внутреннюю энергию определялся выражением:

$$U = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle + N \sum_{\delta} J_{\delta} \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta} \rangle. \quad (25)$$

Здесь первое слагаемое отвечает кинетической энергии электронов, а второе слагаемое их обменному взаимодействию. При этом поведение антиферромагнитного спинового коррелятора во внешнем магнитном поле и с измене-

нием температуры описывалось формулой [12]:

$$\langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_\perp} \rangle = \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_\perp} \rangle_0 \left(1 - \left(\frac{H}{H^*} \right)^2 \right) \left(1 - \left(\frac{T}{T^*} \right)^3 \right)$$

при $H \ll H^*$ и $T \ll T^*$, где H^* и T^* - характерные значения магнитного поля и температуры, в пределах которых происходит заметное изменение спинового коррелятора.

Молярная теплоемкость, обусловленная t-J гамильтонианом, вычисляется по формуле:

$$C_{t-J} = 4N_A \frac{dU}{dT}.$$

При этом в формуле учтено, что на каждую элементарную ячейку $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ приходится четыре иона кислорода в плоскостях.

Суммарная молярная теплоемкость образца, ввиду предполагаемой независимости подсистем, выражается суммой электронной теплоемкости, теплоемкости ионов меди Cu^{2+} и решеточной теплоемкости:

$$C = C_{t-J} + C_{loc} + \beta T^3.$$

Следует учесть, что β может зависеть от температуры отжига образцов в силу различий в их структуре.

Для соответствия данных, полученных с помощью теоретической модели, данным, полученным экспериментально, были выбраны следующие параметры: $t_1 = -2.0eV$, $H^* = 11T$, $K = 600K$, $\lambda = 1000K$, $\Delta = 0.8K$, $I_{ex} = 500K$, $n_1 = 0.01$, $p = 1/4$, $\langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_\perp} \rangle_0 J_{\delta_\perp} (T^*)^{-3} = 2.4 \cdot 10^{-8} eV/K^3$ одинаковые для всех температур отжига.

Для всех рассматриваемых образцов концентрация дырок мала, и энергия Ферми находится вблизи верхней границы энергетического спектра, где плотность состояний в двумерном случае меняется медленно. Это приводит к слабой зависимости плотности состояний на уровне Ферми от концентрации дырок в CuO_2 плоскостях, а следовательно и от концентрации кислорода. В результате $\gamma = 1.5 mJ/(mol \cdot K^2)$, рассчитанный коэффициент низкотемпературной электронной теплоемкости $C_t = \gamma T$, обусловленной кинетической энергией U_t , оказывается с достаточной точностью одинаков для всех рассмотренных образцов.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Для двумерного антиферромагнетика получены условия, при выполнении которых приложение внешнего магнитного поля индуцирует квантовый фазовый переход диэлектрик-полуметалл. В окрестности точки фазового перехода в полуметаллическом состоянии концентрация фермионов линейно растет при увеличении внешнего магнитного поля.
2. Показано, что в области магнитных полей, меньших критического в двумерном слабо легированном антиферромагнетике реализуется эффект отрицательного магнитосопротивления. При учете скоса магнитных подрешеток вычислена зависимость от магнитного поля теплоемкости носителей тока в двумерном слаболегированном антиферромагнетике.
3. Для модели двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика с гейзенберговским взаимодействием в приближении Тябликова найден спектр магнанных возбуждений и температура Нееля. Показано, что эффективный обменный параметр, характеризующий двумерность магнитных взаимодействий, формируется в виде среднего геометрического двух межплоскостных обменных параметров.
4. Вычислена низкотемпературная, зависящая от магнитного поля, ренормировка теплоемкости двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика, приводящая к отрицательному линейному по температуре вкладу.
5. Для недодопированного соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ предложена модель формирования шоттковских центров. На ее основе проведен расчет низкотемпературной теплоемкости $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. Полученные зависимости этой величины от температуры и магнитного поля хорошо описывают экспериментальные особенности, наблюдаемые во внешнем магнитном поле.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. К.А.Шайхутдинов, С.И.Попков, А.Н.Лавров, Л.П.Козеева, М.Ю.Каменева, В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили, А.Д.Федосеев. Особенности низкотемпературной теплоемкости недодопированных монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // Письма в ЖЭТФ.-2010.-Т.92.-С.369.
2. В.В.Вальков, А.Д.Федосеев. Термодинамические свойства двухслойных квазидвумерных антиферромагнетиков // ТМФ.-2011.-Т.168.-С.417.

3. В.В.Вальков, А.Д. Федосеев. Зависимость транспортных свойств проводящего двумерного антиферромагнетика от магнитного поля // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы.-2012.-10.-С.29.
4. В.В.Вальков, А.Д.Федосеев. Теплоемкость и магнитосопротивление слаболегированного двумерного антиферромагнетика в неколлинеарной фазе // Тезисы докладов XXXIII международной зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка".-2010.-С.83.
5. К.А.Шайхутдинов, С.И.Попков, А.Н.Лавров, Л.П.Козеева, М.Ю.Каменева, В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвилли, А.Д.Федосеев. Природа шоттковских центров и поведение теплоемкости $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в магнитном поле // Труды 13-го международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов".-2010.-Т.1.-С.94.
6. В.В.Вальков, А.Д.Федосеев. Теплоемкость и магнитосопротивление слаболегированного двумерного антиферромагнетика в неколлинеарной фазе // Тезисы 1-го международного симпозиума "Физика межфазных границы и фазовые переходы".-2011.-Т.1.-С.51.
7. В.В.Вальков, А.Д.Федосеев. Спектр возбуждений и температура Нееля двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика // Тезисы 14-го международного симпозиума "Упорядочение в минералах и сплавах".-2011.-Т.1.-С.54.
8. К.А.Шайхутдинов, С.И.Попков, В.В.Вальков, А.Д.Федосеев, А.Н.Лавров, Л.П.Козеева, М.Ю.Каменева. Особенности низкотемпературной теплоемкости недодопированных монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // Сборник расширенных тезисов четвертой международной конференции "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости".-2011.-С.174.
9. В.В.Вальков, А.Д.Федосеев. Термодинамика двухслойного квазидвумерного антиферромагнетика // Тезисы докладов международной зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка-XXXIV".-2012.-С.104.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] M.K.Wu et al. Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure // Phys. Rev. Lett.-1987.-V.58.-P.908-910.
- [2] Э.Л.Нагаев. Физика магнитных полупроводников // "Наука".-М.-1979.
- [3] В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили. Влияние антиферромагнитного упорядочения на эффект де Гааза-ван-Альфена // ФТТ.-1997.-Т.39.-С.204-210.
- [4] S.Shimizu et.al. Uniform mixing of antiferromagnetism and high- T_c superconductivity in multilayer copper oxides $Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n}F_2$ ($n=2,3,4$) with apical fluorines: ^{63}Cu -NMR/NQR and ^{19}F -NMR studies // Phys. Rev. B.-2009.-V.79.-P.064505.
- [5] H.Shishido et. al. Tuning the dimensionality of the heavy fermion compound $CeIn_3$ // Science.-2010.-V.327.-P.980.
- [6] R.J.Birgeneau et. al. Magnetic neutron scattering in hole-doped cuprate superconductors // J. Phys. Soc. Jap.-2006.-V.75.-P.111003.
- [7] M.A.Hossain et. al. In situ doping control of the surface of high-temperature superconductors // Nature Physics.-2008.-V.4.-P.527.
- [8] В.И.Белявский, В.В.Капаев, Ю.В.Копаев. Топология поверхности Ферми и сосуществование орбитального антиферромагнетизма и сверхпроводимости в купратах // Письма в ЖЭТФ.-2005.-Т.81.-С.650.
- [9] J.Slater. The band theory of antiferromagnetism // Phys. Rev.-1951.-V.82.-P.538.
- [10] Н.А. Козлов, А.Ф. Барабанов. К теории спиновой восприимчивости иттриевых купратов в рамках двухплоскостной модели фрустрированного антиферромагнетика // Письма в ЖЭТФ.-2007.-Т.85.-С.673.
- [11] P.W.Anderson. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions // Phys. Rev.-1959.-V.115.-P.2.
- [12] Е.В. Кузьмин. Двумерная модель Гейзенберга со спином $s = 1/2$ и антиферромагнитным обменом как спиновая жидкость // ФТТ.-2002.-Т.44.-С.1075.

Подписано в печать 16.11.2012 г.
Формат 60 × 84/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 60 экз. Заказ № 98
Отпечатано в типографии ИФ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН