

УДК 539.196

© 1992

ЯДЕРНАЯ МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И СДВИГ НАЙТА ЯДЕР ^{63}Cu В ВТСП

А. Ю. Завидонов

С учетом сильных межэлектронных корреляций построена теория ядерной магнитной релаксации и сдвига Найта ядер ^{63}Cu в ВТСП.

Обычно свойства ВТСП описывают с помощью гамильтониана Хаббарда

$$\hat{H} = \sum \varepsilon_{k\sigma}^a a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum \varepsilon_{k\sigma}^b b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + \sum t_k (a_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}) + U \sum n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (1)$$

где операторы $a_{k\sigma}$, $b_{k\sigma}$ относятся соответственно к медной и кислородной подсистемам; t_k — параметр гибридизации; $\varepsilon_{k\sigma}^a$ — энергия d -электронов; $\varepsilon_{k\sigma}^b$ — энергия электронов кислорода; U — параметр кулоновского отталкивания d -электронов; индекс j нумерует атомы меди.

В пределе $U \gg t_k$ гамильтониан (1) может быть исследован в рамках теории возмущения [1]. Тогда, предполагая, что кислородная зона $\varepsilon_{k\sigma}^b$ (π -зона) расположена вблизи верхней хаббардовской зоны и $U \rightarrow \infty$, можно получить энергетический спектр гамильтониана (1)

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{k\sigma}^a + \varepsilon_{k\sigma}^b \pm \sqrt{(\varepsilon_{k\sigma}^a - \varepsilon_{k\sigma}^b)^2 + 4nt_k^2}), \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_{k\sigma}^a - U, \quad (2)$$

где $2n$ — число электронов, приходящихся на один узел меди. Энергия в (2) отсчитывается от середины кислородной зоны $\varepsilon_{k\sigma}^b$.

Скорость продольной релаксации $1/T_1$ и сдвиг Найта K_a ядер ^{63}Cu могут быть получены на основе следующих общих выражений [2]:

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_a = \frac{3}{2} \left(\frac{A_a}{N\hbar} \right)^2 \sum \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_a t} \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow} a_{k''\downarrow}^+ (t) a_{k''\uparrow} (t) \rangle, \quad (3)$$

$$K_a = - \frac{A_a}{2\gamma_a \hbar} \sum_k [\langle a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} \rangle - \langle a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow} \rangle], \quad (4)$$

A_a — константа сверхтонкого взаимодействия; ω_a — частота резонансного перехода; $a_{k\sigma}^+(t)$ — операторы в гейзенберговском представлении; $\gamma_a = g_a^2 \beta_n^a$ (β_n — ядерный магнетон).

Используя метод функций Грина, можно показать, что

$$a_{k\sigma}(t) = A_{k\sigma}^{(1)} e^{i\varepsilon_1 t/\hbar} + A_{k\sigma}^{(2)} e^{i\varepsilon_2 t/\hbar} + A_{k\sigma}^{(3)} e^{i\varepsilon_3 t/\hbar}. \quad (5)$$

Операторы $A_{k\sigma}^{(l)}$ имеют вид

$$A_{k\sigma}^{(l)} = \frac{nt_k}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \left(b_{k\sigma} + \frac{t_k}{\varepsilon_l - \varepsilon_k^a} G_{k\sigma} \right), \quad (l = 1, 2), \quad (6)$$

$$A_{k\sigma}^{(3)} = a_{k\sigma} - G_{k\sigma}, \quad (7)$$

$$G_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_{j\sigma} n_{j-\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}j}. \quad (8)$$

Очевидно, что операторы $A_{k\sigma}^{(l)}$ соответствуют квазичастицам в подзонах ε_l . Действительно,

$$[A_{k\sigma}^{(l)}, \hat{H}]_- = \varepsilon_{(l)} A_{k\sigma}^{(l)}. \quad (9)$$

Далее предположим, что операторы $A_{k\sigma}^{(l)}$ являются квазифермиевскими. Это означает замену соответствующих антикоммутирующих s -числами

$$[A_{k\sigma}^{(l)}, A_{k'\sigma'}^{(l')}]_+ = n \left[1 + (-1)^l \left(\frac{\varepsilon_l - \varepsilon_k^q}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} \right) \right] \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} = \alpha_k^{(l)} \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (l = 1, 2). \quad (10)$$

Коммутационные соотношения для операторов $A_{k\sigma}^{(3)}$ мы не выписываем вследствие отсутствия вклада от этой подзоны в $1/T_1$ и K_a (она полностью заполнена). Тогда, используя (5), (10), выражения (3), (4) можно записать в виде

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_a = \frac{3\pi}{h} A_a^2 \sum_{l=1,2} \int_{-W/2}^{W/2} d\varepsilon \frac{\rho^2(\varepsilon)}{|\partial\varepsilon_l/\partial\varepsilon|} \alpha_l^2 f_{\varepsilon_l} (1 - f_{\varepsilon_l}), \quad (11)$$

$$K_a = - \frac{A_a \beta_\varepsilon}{\gamma_a} n \sum_{l=1,2} \int_{-W/2}^{W/2} \partial\varepsilon \rho(\varepsilon) \left\{ (-1)^{l+1} f_{\varepsilon_l} \frac{nt^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^3} - \right. \\ \left. - \frac{(1 - f_{\varepsilon_l}) f_{\varepsilon_l}}{2kT} \frac{\alpha_l}{n} \left[\frac{\alpha_l}{n} (g_a - g_b) + g_b \right] \right\}, \quad (12)$$

где g_a, g_b — g -факторы электронов меди и кислорода; $\rho(\varepsilon)$ — плотность энергетических состояний в кислородной зоне ε_k^b ; W — ширина кислородной зоны; β_ε — магнетон Бора; f_{ε_l} фермиевская функция распределения. В выражениях (11), (12) для простоты предположено, что $t_k = t$ не зависит от волнового вектора.

Рассмотрим сверхпроводящую фазу. Предполагая фононный механизм спаривания квазичастиц (s -типа), обусловленный сильным взаимодействием d -электронов меди с решеткой, можно получить спектр элементарных возбуждений сверхпроводника в виде

$$E_l = \sqrt{\varepsilon_l^2 + \Delta_l^2}. \quad (13)$$

Энергетическая щель $\Delta_l = \alpha_l \Delta_0$ (Δ_0 — константа) определяется самосогласованно

$$1 = |V_0| \int_{\varepsilon_l^{(D)}}^{\varepsilon_l^{(D)}} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{\alpha_l^2}{E_l} \operatorname{th} \frac{E_l}{2kT}, \quad (l = 1, 2). \quad (14)$$

Пределы интегрирования удовлетворяют уравнению

$$\varepsilon_l \left\{ (-1)^l \frac{W}{2} \right\} \pm \varepsilon_D = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_a + \varepsilon_{\pm}^{(D)} + (-1)^{l+1} \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_{\pm}^{(D)})^2 + 4nT^2} \right), \quad (15)$$

где величина $\varepsilon_1(-W/2)$ соответствует нижнему краю подзоны ε_1 , а величина $\varepsilon_2(W/2)$ — верхнему краю подзоны ε_2 ; ε_D — энергия Дебая.

Как известно [3], скорость магнитной релаксации ядер ^{63}Cu в ВТСП не имеет характерного ускорения при $T \sim T_c$. Это связывается с тем, что химический потенциал системы находится в области гибридизационной щели, разделяющей подзоны ε_1 и ε_2 . Можно показать, что химический потенциал не покидает область гибридизационной щели вплоть до концентрации донанта (кислорода), соответствующей металлической фазе ВТСП.

Если реализуется указанная выше ситуация, то фактор когерентности

$$\nu = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_1' + \Delta_1 \Delta_1'}{E_1 E_1'} \right), \quad (16)$$

ответственный в теории БКШ за ускорение $1/T_1$ в области T_c , будет равен 1. Отличие от обычного металла в данном случае в том, что для металла величина $\varepsilon_1 \varepsilon_1'$ в (16) является знакопеременной, в то время как в нашем случае величина $\varepsilon_1 \varepsilon_1'$ всегда положительная. Поэтому результаты интегрирования выражения (3) в этих двух случаях будут различными. Таким образом, скорость релаксации ядер ^{63}Cu в сверхпроводящей фазе получается из (11) просто заменой $|\partial \varepsilon_l / \partial \varepsilon|$ на $|\partial E_l / \partial \varepsilon|$.

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_a = \frac{3\pi}{h} A_a^2 \sum_{l=1,2} \int_{-w/2}^{w/2} d\varepsilon \frac{\rho^2(\varepsilon)}{|\partial E_l / \partial \varepsilon|} \alpha_l^2 f_{E_l} (1 - f_{E_l}). \quad (17)$$

Сдвиг Найта K_a при $T \ll T_c$ может быть записан в виде

$$K_a = -\frac{A_a \beta_c}{2\gamma_a} n \sum_{l=1,2} \int_{-w/2}^{w/2} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \left\{ - (g_a \sin^2 \theta_l + g_b \cos^2 \theta_l) \times \right. \\ \times \frac{\sin^2 \theta_l}{kT} f_{E_l} (1 - f_{E_l}) + (g_b - g_a) \frac{\sin^3 \theta_l}{t} \times \\ \left. \times \cos^3 \theta_l \left(1 - \frac{\varepsilon_l}{E_l} \operatorname{th} \frac{E_l}{2kT} \right) \right\}, \quad (18)$$

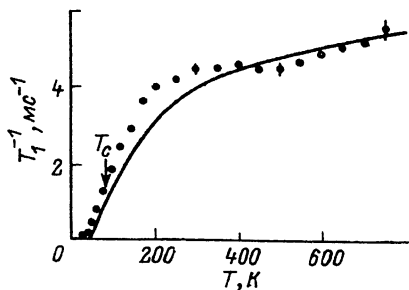


Рис. 1. $1/T_1$ ядер ^{63}Cu в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_{8+x}$.

Точки — эксперимент [3], линия — теория (11), (17). $W = 7000$ К, $\epsilon_a = 1000$ К, $t = 1000$ К, $\sqrt{V_0} = 3850$ К, $\epsilon_D = 440$ К, $A_a = 55 \cdot 10^{-4}$ см $^{-1}$.

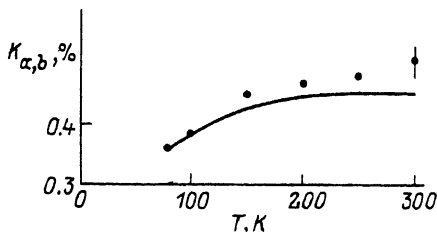


Рис. 2. K_{\perp} ядер ^{63}Cu в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_{8+x}$.

Точки — эксперимент [4], линия — теория (12), $g_a = 2.08$, $g_b = 2$.

$$\cos^2 \theta_l = \left[1 + (-1)^l \left(\frac{\epsilon_l - \epsilon}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \right) \right]. \quad (19)$$

Сравнение теории и эксперимента для соединений 1—2—4 приведено на рис. 1—3. Видно, что теория хорошо согласуется с экспериментом.

Таким образом, в рамках нашей модели можно заключить, что: 1) ВТСП могут быть достаточно хорошо описаны в рамках гипотезы об S-спаривании квазичастиц, обусловленном сильным взаимодействием d-электронов меди с фононами; 2) особенности физических свойств ВТСП связаны с тем, что химический потенциал системы находится в области гибридизационной щели.

Данная работа выполнена в рамках проекта № 333 Государственной программы «Высокотемпературная сверхпроводимость».

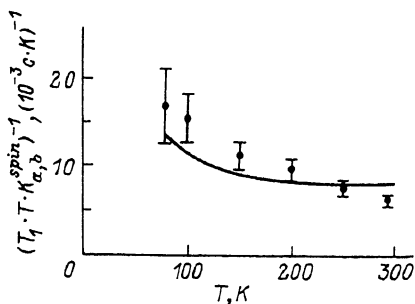


Рис. 3. $(T_1 \cdot T \cdot K_a)^{-1}$ ядер ^{63}Cu в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_{8+x}$.

Точки — эксперимент [4], линия — теория.

Список литературы

- [1] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238—252.
- [2] Александров И. В. Теория магнитной релаксации. М.: Наука, 1975. С. 400.
- [3] Zimmermann H. et al. // Physica C. 1989. V. 159. P. 681—688.
- [4] Zimmermann H. et al. // 25 Congress Ampere. Stuttgart, 1990. P. 282—283.

Казанский
государственный университет

Поступило в Редакцию
8 июля 1991 г.
В окончательной редакции
14 ноября 1991 г.