[5] *Пожела И. П., Урбонас Д.-Т. А.* Доменные и магнитооптические запоминающие устройства. Тез. докл. и сообщений. Тбилиси, 1987, с. 88.
[6] *Осуховский В. Э., Дитина З. З., Линкова Д. Е.* и др. ФТТ, 1986, т. 28, № 2, с. 585—587.

Дальневосточный государственный университет
Владивосток

Поступило в Редакцию
15 февраля 1988 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела, том 30, в. 8, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 8, 1988

К ТЕОРИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков

Одно из возможных теоретических описаний высокотемпературной сверхпроводимости основывается на модели Хаббарда [1] для квадратной решетки с гамильтонианом

$$\hat{H}=t\sum_{s_1s_2\sigma}a^+_{s_1\sigma}a_{s_2\sigma}+U\sum_{s\sigma}a^+_{s\sigma}a_{s\sigma}a^+_{s-\sigma}a_{s-\sigma},$$

s_i — номера узлов, суммирование в первом члене идет по ближайшим соседям. При этом в пределе $\alpha=t/U\ll 1$ в качестве основного состояния с одним электроном на узел выбирают либо антиферромагнитное с двумя подрешетками [2, 3] (состояние Нееля), либо состояние, образованное из синглетных резонансных пар (состояние RVB) [4, 5].

Ниже для невырожденной модели Хаббарда развивается подход RVB [6] путем построения резонансных состояний на квадратных блоках из четырех узлов (без перехода к эффективному спиновому гамильтониану). В качестве вариационной волновой функции основного состояния системы выберем

$$\Psi_{\text{осн}}=\prod_{\mathbf{n}}\left\{1+\sum_{\mathbf{g},\,i,j}\beta^{ij}_{\mathbf{g}}\hat{X}^{3^i4}_{\mathbf{n}}\hat{X}^{5^j4}_{\mathbf{n+g}}\right\}\Psi_0,\qquad \Psi_0=\prod_{\mathbf{n}}|4^0_{\mathbf{n}}\rangle. \tag{1}$$

Здесь и в дальнейшем $|A^i_{\mathbf{n}}\rangle$ — точные состояния квадратного блока $\mathbf{n}$ из четырех узлов с A электронами ($A=0\div 8$); i — набор квантовых чисел; $\hat{X}^{\lambda\mu}_{\mathbf{n}}$ — оператор Хаббарда [1], переводящий блок $\mathbf{n}$ из состояния μ в состояние λ; суммирование идет по ближайшим блокам-соседям $\mathbf{g}$ и квантовым числам i, j; $\beta^{ij}_{\mathbf{g}}$ — вариационные параметры. Состояние нулевого приближения Ψ_0 построено из независимых блоков с четырьмя электронами, находящимися в синглетном состоянии $|4^0_{\mathbf{n}}\rangle$ с низшей энергией $\varepsilon^0_4=-12\alpha\, t$ (везде ниже верхний индекс у $|4^0_{\mathbf{n}}\rangle$ опущен). Пробная функция (1) с использованием всех состояний $|3^i\rangle$, $|5^j\rangle$ приводит к значению энергии на блок $\varepsilon=\varepsilon^0_4+\varepsilon'_4$, $\varepsilon'_4=-4\alpha\, t+O(\alpha^2\, t)$, т. е. такой же величины, как для классического состояния Нееля. При этом, однако, в (1), так же как и у состояния RVB, отсутствуют магнитные подрешетки, среднее значение спина на узле равно нулю, а спиновые корреляторы отличны от нуля (ср. [7, 8]). Можно убедиться, что при большом расстоянии между узлами l функция (1) приводит к спаданию спиновых корреляторов по закону α^l. Возможно, что точному решению задачи отвечает степенной закон, как в одномерном случае [9].

Рассмотрим одночастичные возбуждения дырочного типа (одночастичные электронные возбуждения можно описать, используя электрондырочную симметрию) с квазиимпульсом $\mathbf{p}$ (в приведенной зоне Бриллюэна). Ограничимся простейшим приближением

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{j}=\sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{n}} X_{\mathbf{n}}^{3^j 4}\Psi_{\text{осн}}. \qquad (2)$$

Состояния с тремя электронами в блоке $|3^j\rangle$, так же как и все другие состояния блока, классифицируются по представлениям группы симметрии гамильтониана блока. Пусть $\hat{C}_4$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{R}$ — операторы поворота на $\pi/2$, отражения относительно oy и инверсии спинов, а q, v и r — соответствующие собственные значения. Четыре состояния отвечают низшей энергии блока, равной $\bar{\varepsilon}_3=-2t+O(\alpha t)$, и имеют полный спин $s=3/2$ и q, $v=-1$. Следующие 4 состояния $|3^{v,r}\rangle$ преобразуются по двумерному представлению $v=\pm 1$, $r=\pm 1$, $\hat{C}_4|3^{v,r}\rangle=-v|3^{-v,r}\rangle$ и имеют энергию $\varepsilon_3^0=-\sqrt{3}t-5\alpha t$ и спин $s=1/2$.

Спектр состояний (2) определяется матричными элементами $\langle 4_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}3_{\mathbf{n}}^{i}|\hat{H}|4_{\mathbf{n}}3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{j}\rangle$. Можно показать, что эти матричные элементы равны нулю для состояний блока с энергией $\bar{\varepsilon}_3$, так как эти состояния имеют $s=3/2$, а $|4_{\mathbf{n}}^0\rangle$ — $s=0$. Поэтому энергия $\Psi_{\mathbf{p}}$ (2), построенного на основе этих состояний блока, не зависит от импульса и равна $\varepsilon=-2t+O(\alpha t)$. Спектр, отвечающий $\Psi_{\mathbf{p}}$ (2), построенному из состояний $|3^{v,r}\rangle$, равен

$$\varepsilon_v(\mathbf{p})=\varepsilon_3^0+\varepsilon_3',$$
$$\varepsilon_3'=-2\gamma v(\cos p_x 2a-\cos p_y\cdot 2a)-\varepsilon_4',$$
$$\gamma=\left|\langle 3_{\mathbf{n}}^{v,r}4_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}|\hat{H}|4_{\mathbf{n}}3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{v,r}\rangle\right|=\frac{1}{8}t\left(1+2\sqrt{6}\alpha+O(\alpha^2)\right), \qquad (3)$$

α — постоянная решетки. Из (3) видно, что дырка в состоянии $|3^{v,r}\rangle$ имеет наименьшую энергию $\varepsilon_3=-\left(\sqrt{3}+0.5\right)t+O(\alpha t)$, т. е. благодаря перескокам опускается ниже, чем $\bar{\varepsilon}_3$. Спектр (3) приводит к эффективной массе около дна зоны, равной $1/8\gamma a^2$, что совпадает с приближением Хаббард I [10]. Напомним, что дырки в состоянии Нееля неподвижны.

Особый интерес в этой системе имеют возбуждения «связанная дырочная пара». В настоящем сообщении ограничимся рассмотрением покоящейся пары ($\mathbf{p}=0$). Соответствующую волновую функцию запишем в приближении

$$\Psi_2=\sum_{\mathbf{n}}\left\{X_{\mathbf{n}}^{24}+\sum_{\mathbf{m}\neq 0,\,v,\,r}\Phi_{\mathbf{m}}^{vr}X_{\mathbf{n}}^{3^{v,r}4}X_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}^{3^{v,-r}4}\right\}\Psi_{\text{осн}}. \qquad (4)$$

Здесь $|2\rangle$ — основное состояние блока с двумя электронами ($q=v=1$, $r=-1$), $\varepsilon_2^0=-2\sqrt{2}t-4\alpha t$. Так как состояние $|4_{\mathbf{n}}^0\rangle$ имеет $r=+1$, то волновая функция (4) отвечает синглетному спариванию.

Из условия того, чтобы при преобразованиях $\hat{C}_4$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{R}$ сумма в (4) преобразовывалась так же, как $\hat{X}^{24}$, находим, что

$$\Phi_{\mathbf{m}}^{vr}=r\Phi_{\mathbf{m}}\left[(-1)^{m_y}\delta_{v,+1}+(-1)^{m_x}\delta_{v,-1}\right].$$

Среднее значение энергии в состоянии (4) равно

$$E_{4N-2}=\frac{\langle\Psi_2|\hat{H}|\Psi_2\rangle}{\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle}=(N-2)\varepsilon_4^0+2\varepsilon_3+\varepsilon_{\text{св}},$$

$$\varepsilon_{\text{св}}=\frac{\varepsilon_2^0+\varepsilon_4^0-2\varepsilon_3+16\varepsilon_4'\Phi_{\mathbf{g}}^2-8\left\{8\tau\Phi_{\mathbf{g}}-\gamma\left[1+8\Phi_{\mathbf{g}}^2+4\sum_{\mathbf{n}\neq 0,\,\mathbf{g}}(\Phi_{\mathbf{n}}-\Phi_{\mathbf{n}+\mathbf{g}})^2\right]\right\}}{1+8\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\Phi_{\mathbf{n}}^2}, \qquad (5)$$

$$\tau=\left|\langle 2_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}4_{\mathbf{n}}|\hat{H}|3_{\mathbf{n}}^{v,r}3_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{v,-r}\rangle\right|,$$

$\mathbf{g}$ — выделенный ближайший сосед нулевого блока, N — число блоков в системе. Прямое вычисление дает $\tau=0.197t+O(\alpha t)$. Из выражения (5) очевидно, что при выборе Φ_n=const $\varepsilon_{св}$ обращается в нуль, т. е. волновая функция (4) описывает в этом случае две невзаимодействующие дырки.

При минимизации выражения (5) по вариационным параметрам Φ_m будем предполагать, что их величины зависят только от числа шагов k, необходимых для перескока с блока 0 на блок m. В предположении экспоненциальной зависимости Φ_m от k оценка для $\varepsilon_{св}$ и радиуса пары k_0 в линейном приближении по t приводит к значениям $\varepsilon_{св}\approx 0.1\,t$, $k_0\approx 2$. При характерных значениях $t\sim 1$ эВ получаем $\varepsilon_{св}\sim 10^3$ К (учет членов $\sim \alpha t$ только увеличивает энергию связи). Однако само существование пар обусловлено основным состоянием (1), которое разрушается при температуре $\sim t^2/U$. Напомним, что эту температуру не следует отождествлять с температурой сверхтекучего (сверхпроводящего) перехода, определяемой Бозе-конденсацией пар и пропорциональной их концентрации.

Таким образом, проведенное вариационное рассмотрение показывает, что возникающим на фоне RVB состояния (1) двум дыркам энергетически выгодно связаться в синглетную пару с зарядом $2e$. С Бозе-конденсацией таких пар связана возможность существования сверхпроводимости в рассмотренной модели [4]. В заключение отметим, что в одномерном случае аналогичное рассмотрение приводит к нулевой энергии связи пары, а в квазиодномерном (две параллельные цепочки) энергия связи отлична от нуля.

Литература

[1] *Hubbard J.* Proc. Roy. Soc. (A), 1963, vol. 276, N 1365, p. 238—257; 1965, vol. 285, N 1403, p. 542—560.
[2] *Emery V. J.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 26, p. 2794—2797.
[3] *Hirsh J. E.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 2, p. 228—231.
[4] *Anderson P. W., Baskaran G., Zou Z., Hsu T.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 26, p. 2790—2793.
[5] *Kivelson S., Roksar D., Sethna J.* Phys. Rev., 1987, vol. B35, N 16, p. 8865—8868.
[6] *Fazekas P., Anderson P. W.* Phil. Mag., 1974, vol. 30, N 2, p. 423—440.
[7] *Покровский В. Л., Уймин Г. В.* ЖЭТФ, 1971, т. 61, № 2, с. 859—869.
[8] *Барабанов А. Ф., Михеенков А. В.* ФТТ, 1986, т. 28, № 4, с. 998—1004.
[9] *Luther A., Peschel J.* Phys. Rev., 1975, vol. B12, N 9, p. 3908—3917.
[10] *Зайцев Р. О., Кузьмин Е. В., Овчинников С. Г.* УФН, 1986, т. 148, № 4, с. 603—636.

Институт физики высоких давлений
им. Л. Ф. Верещагина АН СССР
Троицк
Московская область

Поступило в Редакцию
12 октября 1987 г.
В окончательной редакции
16 февраля 1988 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела, том 30, в. 8, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 8, 1988

ВЛИЯНИЕ НА ТЕМПЕРАТУРУ ПЕРЕХОДА T_c ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ЭКСПОЗИЦИИ ЕГО В ПАРАХ АЗОТА

А. И. Головашкин, И. С. Левченко, Г. П. Мотулевич, Л. М. Полухина

Одним из основных вопросов, связанных с применением новых высокотемпературных сверхпроводников, является вопрос об их стабильности. В литературе приводился целый ряд примеров нестабильности указанных сверхпроводников, возникающей при воздействии различных реагентов или температуры.

В данной работе мы исследовали нестабильность, связанную с экспозицией сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в парах азота при разных температурах.