

02,11,12

# Влияние локальных корреляций на переход „однородный изолятор—сверхпроводник“ в доменных границах фазы зарядового порядка 2D-системы со смешанной валентностью

© В.В. Конев, В.А. Улитко, Д.Н. Ясинская, Ю.Д. Панов, А.С. Москвин

Уральский федеральный университет,  
Екатеринбург, Россия

E-mail: vitaliy.konev@urfu.ru

В рамках (псевдо)спинового  $S = 1$  формализма показано, что структура антифазных доменных границ в фазе зарядового упорядочения системы со смешанной валентностью типа „триплета“  $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$  в купратах на двумерной квадратной решетке существенно зависит от параметра одноцентровых корреляций  $U$ . Компьютерное моделирование на больших квадратных решетках иллюстрирует изменение структуры границ от однородной моновалентной непроводящей типа  $\text{Cu}^{2+}$  до нитевидной сверхпроводящей при относительно небольшом изменении положительных значений  $U$ .

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации, соглашение № 02.А03.21.0006 и проектов № 2277 и № 5719 Министерства Образования и Науки Российской Федерации.

DOI: 10.21883/FTT.2018.11.46644.01NN

## 1. Введение

Наряду с сильноанизотропными магнетиками на основе  $\text{Ni}^{2+}$  ( $S = 1$ ), например,  $[\text{Ni}(\text{HF}_2)(3\text{-Clpy})_1]\text{BF}_4$  и  $\text{NiCl}_24\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ , интерес к системам со спином  $S = 1$  связан и с так называемыми псевдоспиновыми системами типа „полужестких“ (semi-hard-core) бозонов с ограничением на заполнение узлов решетки  $n = 0, 1, 2$ , или системами ионов со смешанной валентностью типа „триплета“  $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$  в купратах  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{Bi}^{3+,4+,5+}$  в висмутатах [1]. Во всех случаях фазовая диаграмма спиновых или псевдоспиновых систем с ( $S = 1$ ) существенно богаче, чем в случае аналогичных систем с квантовым (псевдо)спином  $S = 1/2$ , прежде всего за счет появления принципиально новых слагаемых в гамильтониане типа одноионной анизотропии и биквадратичных взаимодействий и принципиально новых фаз типа квантового парамагнетика и спин-нематика.

В зависимости от величины параметров локальных и межцентровых заряд-зарядовых корреляций, интегралов одно- и двухчастичного переноса, а также полного заряда, основное состояние таких систем может соответствовать зарядовому упорядочению, различным типам сверхпроводящего упорядочения, комбинированным фазам типа „суперсолида“ (supersolid) с сосуществованием сверхпроводимости и зарядового порядка, а также специфической для этих систем фазе типа квантового парамагнетика. Для этих систем характерно формирование различных метастабильных неоднородных состояний с развитой доменной структурой и топологическими дефектами типа вихрей и скирмионов [2–4].

В данной работе в рамках псевдоспинового формализма рассмотрена простая система зарядовых триплетов  $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$  в модельном купрате. Мы показываем, что

структура антифазных доменных границ в фазе зарядового упорядочения такой системы существенно зависит от параметра одноцентровых корреляций  $U$ , меняясь от однородной моновалентной непроводящей типа  $\text{Cu}^{2+}$  до нитевидной сверхпроводящей при относительно небольшом изменении положительных значений  $U$ .

## 2. Модельный купрат: псевдоспиновый $S = 1$ формализм

Модельный купрат представляет 2D-систему  $\text{Cu}$ -центров в  $\text{CuO}_2$  плоскости купратов, которые могут находиться в трех различных валентных зарядовых состояниях:  $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$ . Этот зарядовый триплет мы связываем с тремя состояниями псевдоспина  $S = 1$  следующим образом:  $\text{Cu}^{1+} \rightarrow M_S = -1$ ,  $\text{Cu}^{2+} \rightarrow M_S = 0$ ,  $\text{Cu}^{3+} \rightarrow M_S = +1$  и используем известные методы описания спиновых систем.

Спиновая алгебра систем с  $S = 1$  ( $M_S = 0, \pm 1$ ) включает восемь независимых нетривиальных операторов (три дипольных и пять квадрупольных)

$$S_z; S_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (S_x \pm iS_y); S_z^2;$$

$$T_{\pm} = \{S_z, S_{\pm}\} \equiv S_z S_{\pm} + S_{\pm} S_z; S_{\pm}^2. \quad (1)$$

Операторы повышения/понижения  $S_{\pm}$  и  $T_{\pm}$  меняют проекцию псевдоспина на  $\pm 1$ , но различным образом:  $\langle 0|S_{\pm}|\mp 1\rangle = \langle \pm 1|S_{\pm}|0\rangle = \mp 1$ ,  $\langle 0|T_{\pm}|\mp 1\rangle = -\langle \pm 1|T_{\pm}|0\rangle = +1$ . Операторы повышения/понижения  $S_{\pm}^2$  описывают переходы  $|-1\rangle \leftrightarrow |+1\rangle$ , то есть они „рождают“ на узле дырочную ( $S_+^2$ ) или электронную ( $S_-^2$ ) пару, представляющих композитный локальный бозон, с кинематическим ограничением  $(S_{\pm}^2)^2 = 0$ , что подчеркивает его природу как „жесткого“ (hard-core)

бозона. Локальный (узельный) недиагональный параметр порядка  $\langle S_{\pm}^2 \rangle$ , являющийся фактически параметром локального сверхпроводящего порядка, отличен от нуля только в случае, если на узле имеется квантовая суперпозиция состояний  $|-1\rangle$  и  $|+1\rangle$ .

Вводя псевдоспиновый  $S = 1$  формализм для описания зарядовых триплетов, запишем эффективный гамильтониан, который коммутирует с  $z$ -компонентой полного псевдоспина  $\sum_i S_{iz}$  и, таким образом, сохраняет полный заряд системы, как сумму потенциальной и кинетической энергий

$$H = H_{\text{pot}} + H_{\text{kin}}^{(2)}, \quad (2)$$

где

$$H_{\text{pot}} = \sum_i (\Delta S_{iz}^2 - \mu S_{iz}) + \frac{1}{2} V \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz}, \quad (3)$$

а в кинетической энергии мы учтем только вклад двухчастичного переноса локальных композитных бозонов

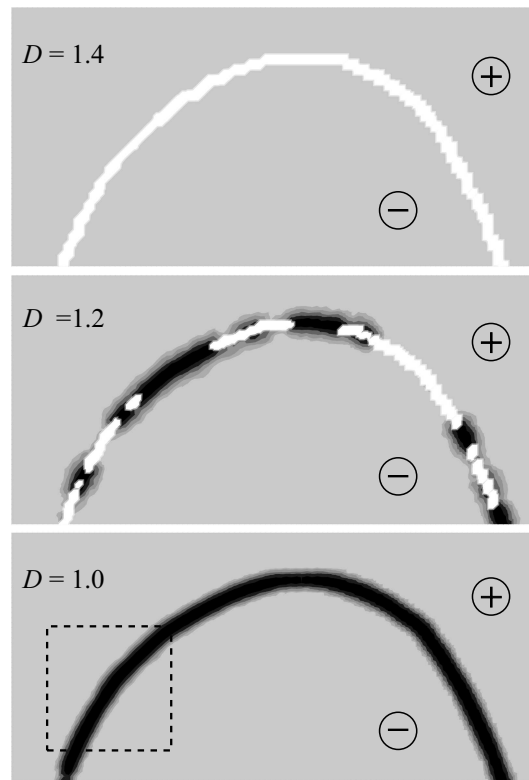
$$H_{\text{kin}}^{(2)} = -\frac{1}{2} t_b \sum_{\langle ij \rangle} (S_{i+}^2 S_{j-}^2 + S_{i-}^2 S_{j+}^2). \quad (4)$$

Первое слагаемое в (3), или „одноионная анизотропия“, описывает корреляционные эффекты плотность-плотность на узлах, причем параметр  $\Delta$  можно связать с известным корреляционным параметром  $U$ :  $\Delta = U/2$ . Второе слагаемое может быть связано с псевдомангнитным полем вдоль оси  $Oz$ , либо с химическим потенциалом относительно добавления новых частиц. Последний член описывает межузельные взаимодействия (корреляции) типа плотность–плотность. Ниже мы ограничиваемся учетом взаимодействия ближайших соседей с положительным (антиферромагнитным) знаком параметра межцентровых корреляций  $V$ .

В зависимости от соотношения между параметрами гамильтониана (2) и величины полного заряда основное состояние системы соответствует либо однородной непроводящей фазе типа квантового парамагнетика с  $\langle S_z \rangle = \langle S_z^2 \rangle = 0$ , реализуемой при больших положительных значениях корреляционного параметра  $\Delta$  (large- $U$  phase), либо непроводящей фазе зарядового упорядочения (CO) — аналогу антиферромагнитного упорядочения вдоль  $z$ -оси, либо сверхпроводящей (SF, superfluid) фазе с отличным от нуля параметром порядка  $\langle S_{\pm}^2 \rangle$ , сопровождаемой однородным ферроупорядочением, или неоднородным антиферроупорядочением (supersolid phase)  $z$ -компонент псевдоспина. Локальный параметр сверхпроводящего порядка  $\langle S_{\pm}^2 \rangle$  может быть представлен в стандартной форме  $|\Psi| e^{\pm i\phi}$  с модулем  $|\Psi|$  и фазой  $\phi$ .

### 3. Особенности структуры антифазных доменных границ СО-фазы

С использованием графического процессора NVidia в рамках метода Монте-Карло мы моделировали фазовый

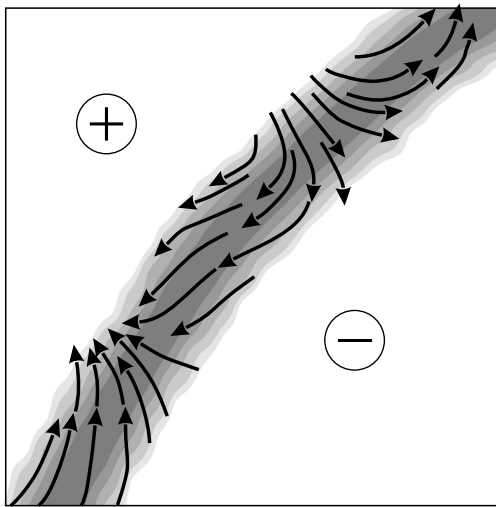


**Рис. 1.** Эволюция антифазной доменной границы с ростом параметра локальной корреляции  $\Delta$ . Выделен фрагмент решетки  $256 \times 256$  с антифазной доменной границей, разделяющей домены зарядового порядка, обозначенные знаками плюс и минус. Черным и белым цветом обозначены нитевидные „сверхпроводящая“ и „родительская“  $\text{Cu}^{2+}$ -фазы соответственно.

переход зарядового упорядочения в модельном купрате в двух-подрешеточном приближении для квадратной решетки  $256 \times 256$  с периодическими граничными условиями при выборе параметров  $t_b = 1$ ,  $V = 0.75$ ,  $\mu = 0$ , обеспечивающим основное состояние типа зарядового упорядочения в достаточно широком диапазоне изменений параметра локальной корреляции  $\Delta$ .

В процессе быстрой термализации (отжига), при  $\Delta = -5$ , происходило формирование разветвленной доменной структуры с появлением при низких температурах ярко выраженной нитевидной (филаментарной) сверхпроводимости в центре антифазных доменных границ СО-фазы, характеризуемой, прежде всего, отличным от нуля значением модуля локального параметра сверхпроводящего порядка, свидетельствующего о существовании локальных квантовых суперпозиций  $\text{Cu}^{1+} - \text{Cu}^{3+}$ . С ростом интеграла переноса композитного бозона  $t_b$  происходит постепенное уширение доменных границ с увеличением объема сверхпроводящего состояния вплоть до полного вытеснения СО-фазы и перехода в неоднородное сверхпроводящее состояние.

Интересно, что как СО-доменная структура, так и сверхпроводящая структура доменной границы оказа-



**Рис. 2.** Распределение фазы локального сверхпроводящего параметра порядка (фазовый поток) в участке доменной границы, выделенном рамкой на рис. 1. Градация серого цвета указывает на неоднородность распределения модуля локального параметра сверхпроводящего порядка.

лись устойчивыми относительно изменения параметра  $\Delta$  локальной корреляции в широком диапазоне, вплоть до значений  $\Delta \approx +1.0$ . Однако при дальнейшем росте локальных корреляций происходит коренная перестройка структуры доменных границ. На рис. 1 представлена картина эволюции антифазной доменной границы с ростом  $\Delta \geq +1.0$ , а на рис. 2 представлено распределение фазы локального сверхпроводящего параметра порядка (фазовый поток) в доменной границе. При постепенном повышении  $\Delta$  нарушается регулярная структура нитевидной сверхпроводимости в центре антифазной доменной границы с появлением участков „родительской“  $\text{Cu}^{2+}$ -фазы, то есть фазы квантового парамагнетика на псевдоспиновом языке, разрастающейся вплоть до полного вытеснения нитевидной сверхпроводимости при  $\Delta \approx +1.4$  и перехода всей границы в  $\text{Cu}^{2+}$ -фазу. При дальнейшем росте корреляций  $\Delta \geq +1.5$  происходит уширение доменной границы с постепенным вытеснением зарядового порядка. Другими словами, фазовый переход: зарядовое упорядочение — родительская фаза (large- $U$ -phase) с ростом параметра локальной корреляции реализуется путем разрастания доменных границ.

Исследование температурных эффектов показывает, что с ростом температуры в доменных стенках  $\text{CO}$ -фазы при  $\Delta = +1.0$  сперва происходит переход из сверхпроводящего состояния в родительскую фазу, а затем в неупорядоченное „парамагнитное“ состояние. Однако при последующем охлаждении вплоть до очень низких температур  $T = 0.0001$  восстанавливается только „родительская“ структура доменных границ, то есть мы имеем дело с температурным гистерезисом структуры границ.

## 4. Заключение

Нами проведено исследование влияния величины локальных корреляций  $\Delta = U/2$  на структуру доменных границ фазы зарядового упорядочения модельного купрата. В ходе численного моделирования методом Монте-Карло на больших квадратных решетках мы смогли наблюдать образование при быстром отжиге разветвленной доменной структуры, в антифазных доменных границах которой формируется нитевидная филаментарная сверхпроводимость, устойчивая в широком интервале изменений  $U$  вплоть до положительных значений  $U \approx 2$ . Однако при дальнейшем росте локальных корреляций нитевидная сверхпроводимость разрушалась и в границах формировалась нитевидная „родительская“  $\text{Cu}^{2+}$ -фаза, разделяющая домены с зарядовым упорядочением  $\text{Cu}^{1+}-\text{Cu}^{3+}$ . Моделирование температурных эффектов указывает на наличие температурного гистерезиса структуры границ.

## Список литературы

- [1] A.S. Moskvina. *ЖЭТФ* **121**, 3, 477 (2015); [*JETP* **121**, 3, 549 (2015)].
- [2] Y.D. Panov, A.S. Moskvina, F.N. Rybakov, A.B. Borisov. *J. Low Temperature Phys.* **185**, 5–6, 488 (2016).
- [3] A.S. Moskvina, Yu.D. Panov, F.N. Rybakov, A.B. Borisov. *J. Superconductiv. Nov. Magnet.* **30**, 1, 43 (2017).
- [4] Y.D. Panov, A.S. Moskvina. *Physica C* **548**, 82 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.physc.2018.02.032>.

Редактор Т.Н. Василевская