

«МАГНИТОДИПОЛЬНАЯ» САМООРГАНИЗАЦИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ И КИНЕТИКА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

А. В. Воронов, В. М. Петникова, В. В. Шувалов*

*Международный лазерный центр Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 4 апреля 2001 г.

Для интерпретации данных нестационарной нелинейной спектроскопии высокотемпературных сверхпроводников построена феноменологическая модель, описывающая «магнитодипольную» самоорганизацию носителей заряда (формирование так называемых страйп-структур и энергетической щели в спектре состояний). Показано, что после быстрого разогрева сверхпроводящего образца кинетика последующего фазового перехода зависит от начальной температуры T . При небольшом «перегреве» $T^* < T < T_m \approx (1.4-1.5)T^*$, где T_c и $T^* \approx T_c$ — температуры перехода в сверхпроводящее состояние и формирования страйп-структур, и оптимальном уровне легирования, несмотря на практически мгновенное исчезновение сверхпроводимости, разрушение страйп-структур (и щели в спектре состояний) происходит медленно (времена более 10^{-9} с).

PACS: 71.10.Hf, 74.25.Jb, 78.47.+p

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в медно-оксидных соединениях [1] привело к взрыву научной активности в исследовании последних. Анализ полученных при этом данных показал [2–4], что эти соединения являются ионными полупроводниками и их «металлическая» проводимость обусловлена нарушениями стехиометрического состава (определенным уровнем дефектности — «легированием»). Электронная структура этих соединений определяется сложным взаимодействием «хорошо» и «плохо» локализованных электронных состояний, чувствительных к ближнему порядку в расположении атомов. Сильная анизотропия приводит к квазидвумерному характеру поверхности Ферми.

Общим свойством медно-оксидных соединений является упорядочение спинов ионов Cu в так называемых купратных (CuO_2) плоскостях. В соединениях стехиометрического состава эти ионы (обычно обозначаемые Cu2) имеют «дырки» со спином $s = 1/2$ в $3d$ -оболочке. Косвенное (через ионы кисло-

рода) обменное взаимодействие устанавливает дальний антиферромагнитный порядок при сравнительно высоких температурах Нееля $T_N = 300-500$ К [5]. Детальное изучение магнитной структуры и спиновых корреляций в металлической фазе проводилось методом нейтронного рассеяния в монокристаллах La_2CuO_6 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [6]. Было показано, что, хотя в этом случае дальний порядок и отсутствует, сильные спиновые флуктуации с широким спектром возбуждения сохраняются. Магнитные моменты ионов Cu2 в бислоях $\text{CuO}_2\text{-Y-CuO}_2$ упорядочены антиферромагнитным образом, а магнитный момент на ионах Cu1, выстроенных в линейные цепочки Cu-O, отсутствует. Методом диффузного магнитного рассеяния была определена зависимость магнитной корреляционной длины ξ_m от средней концентрации дырок $\langle n \rangle$ в купратной плоскости [7]. Изучение магнитного неупругого нейтронного рассеяния в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ позволило найти константы обменного взаимодействия для двух ближайших ионов Cu2 ($2J \approx 0.170$ эВ) в бислоях ($2J_b \approx 10^{-2} \cdot 2J$) и в цепочках Cu2-O1 ($2J' \approx 10^{-5} \cdot 2J$) [8], что доказало квазидвумерность динамики спинов в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Аналогич-

*E-mail: avoronoff@mail.ru

ные данные были получены для $\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$ [9].

Природа энергетической щели в спектре состояний — один из важнейших моментов в понимании явления высокотемпературной сверхпроводимости. В низкотемпературных сверхпроводниках эта (сверхпроводящая) щель имеет так называемую s -симметрию и формируется ниже температуры T_c за счет электрон-фононного взаимодействия при переходе в сверхпроводящую фазу [9]. Экспериментальные данные для высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) свидетельствуют о d - либо смешанной s - d -симметрии щели [10], причем при оптимальном легировании ($\delta = \delta_{opt}$), для которого T_c максимальна, эта щель имеет d -симметрию [11]. Более того, в спектре состояний ВТСП методом фотоэмиссионной спектроскопии высокого углового разрешения (ARPES) была обнаружена так называемая псевдощель [12]. Было показано, что при $\delta = \delta_{opt}$ и $\delta > \delta_{opt}$ (передопированные (overdoped) материалы) энергетическая щель, как и в низкотемпературных сверхпроводниках, исчезает (закрывается) при $T = T_c$ во всех точках поверхности Ферми. При $\delta < \delta_{opt}$ (недодопированные (underdoped) соединения) сверхпроводящая щель при нагреве эволюционирует в псевдощель, имеющую d -симметрию и закрывающуюся при $T = T^* \geq T_c$. Закрывание щели в точке $(\pi/4, \pi/4)$ зоны Бриллюэна происходит при $T = T_c$, в то время как в точке $(\pi, 0)$ — при $T \approx 180 \text{ K} \gg T_c$. Природа и связь псевдощели со сверхпроводящей щелью и по сей день являются предметом бурных дискуссий. Хотя наиболее убедительные ARPES-эксперименты были выполнены на монокристаллах $\text{Ba}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{9-\delta}$, считается, что такое поведение щели характерно для всех ВТСП. Отметим, что недавно в работах по нелинейной нестационарной спектроскопии передопированного соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при $T < T_c$ наблюдались две энергетических щели с разной кинетикой [13]. Одна из этих щелей интерпретировалась авторами как сверхпроводящая щель, а вторая — как псевдощель.

Не менее интересные данные были получены при электронном, нейтронном и рентгеновском рассеянии в соединениях лантана [14–16]. Было показано, что в их купратных плоскостях при $T = T^*$ формируется периодическая последовательность чередующихся сильно вытянутых областей — страйпов (stripes), — часть которых обогащена дырками, а часть практически их лишена. Корреляционная длина (далее «длина») страйпов, ориентированных вдоль кристаллографических направлений $(\pm 1, \pm 1, 0)$, убывает с ростом $\langle n \rangle$. В аналогичных

экспериментах с соединениями висмута, бария и ртути подобных особенностей обнаружено не было. В то же время косвенные данные о наличии страйп-структур в соединениях висмута дают изменения теплопроводности и проводимости, в температурных зависимостях которых наблюдались изломы [16]. По мнению ряда авторов, это свидетельствует о динамическом характере соответствующих страйп-структур и малости их корреляционной длины.

Для описания страйп-структур наиболее популярны два подхода. В основе так называемой t - J -модели лежит гамильтониан, учитывающий кинетическую энергию и корреляции на соседних узлах [17]. В модель вводятся два основных параметра: энергия t «перескока» дырки на ближайшие узлы и энергия J обменного взаимодействия с последними. Иногда учитываются члены, описывающие перескоки дырок на узлы и более далекого окружения. В рамках t - J -модели резкое сужение зоны и соответствующий рост эффективной массы происходят за счет антиферромагнитных спиновых корреляций, подавляющих перескоки дырок между ближайшими узлами. При $J \gg t$ энергетически выгодно пространственное разделение (расслоение) фаз, т. е. формирование реальных областей, часть которых заполнена дырками, а часть практически их лишена. Численные расчеты на базе t - J -модели трудоемки и обычно проводятся на двумерных кластерах небольшого размера (типичный размер примерно 8×8) [18]. Они показывают, что расслоение фаз должно наблюдаться для малых $\langle n \rangle$ при $J/t \geq 1$ [19], в то время как для реальных соединений $J/t \approx 0.35$ [20].

Другой подход — модель Пайерлса–Хаббарда — основан на учете ян-теллеровских искажений решетки [21]. В модельном гамильтониане учитываются перескоки дырок по узлам меди, одноузельные кулоновские корреляции, спиновая динамика, кинетическая и потенциальная энергия решетки. Расчеты в рамках этой модели также доказывают возможность расслоения фаз. Искажения решетки играют стабилизирующую роль, и условие $J/t \geq 1$ смягчается. Однако из-за сложности задачи моделирование обычно проводится на еще меньших кластерах (размером примерно 4×4), что резко снижает точность расчетов [22]. Описание кинетики переходов, связанных с формированием и разрушением страйп-структур, при этом оказывается невозможным.

Основной целью настоящей работы являлось объяснение результатов проведенных нами экспери-

ментов [23] по бигармоническому пикосекундному зондированию спектра состояний тонких сверхпроводящих пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, предварительно возбужденных коротким (20–40 пс) импульсом накачки. В этих экспериментах было показано, что в отсутствие накачки при $T < T_c$ эффективность самодифракции пробных импульсов с частотной расстройкой в пределах ширины энергетической щели убывает практически до нуля, причем эта особенность сохраняется еще, по крайней мере, в течение примерно 1 нс после быстрого разогрева исходно сверхпроводящего образца до $T \approx T_c + (20-30)$ К. В то же время известно, что сверхпроводимость в таких условиях должна исчезать за времена порядка 1 пс [24, 25]. Для объяснения этого парадокса мы построим феноменологическую модель, описывающую процессы самоорганизации дырок в купратных плоскостях ВТСП за счет их «магнитодипольного» [26] взаимодействия, т. е. нелокального взаимодействия, обусловленного процессами спин-волнового обмена. Во всех расчетах будет учитываться лишь нелокальная часть потенциала взаимодействия, полученного в рамках спин-волновой теории [27, 28]. В отличие от локальной части потенциала взаимодействия, описываемой в рамках t - J -модели компенсацией разрыва связи в антиферромагнетике, его нелокальная часть имеет дипольный характер и обусловлена деформациями антиферромагнитного окружения. Соответствующее взаимодействие носит характер притяжения в спин-симметричном канале и отталкивания в спин-антисимметричном канале [27, 28]. Было показано, что при $J/t \gg 1$ энергия взаимодействия составляет примерно $8t^2/J$ [27], в то же время при $J/t \ll 1$ расчет дает значение порядка J [28]. Именно этот второй предельный случай и будет нами рассмотрен ниже. Далее мы протестируем построенную модель по критерию правильности описания известных стационарных свойств страйп-структур и обобщим ее на условия, типичные для экспериментов по нелинейной нестационарной спектроскопии. Мы покажем, что время, необходимое для формирования и разрушения страйп-структур (и соответствующей энергетической щели — псевдощели), может значительно превышать время разрушения сверхпроводимости.

Отметим, что сходное описание процесса формирования страйп-структур, связанное со специфической угловой зависимостью потенциала взаимодействия, было проведено Хомским и Кугелем [29], но ими был рассмотрен другой физический механизм самоорганизации (считалось, что угловая анизотропия обусловлена деформационными искажениями

кристаллической решетки дефектами), а вопросы кинетики самих страйп-структур не рассматривались.

2. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Будем считать, что в решетке медно-оксидных ВТСП вплоть до максимально возможных (для сверхпроводимости) значений δ существует локальное антиферромагнитное упорядочение [6]. Предположив, что кулоновское взаимодействие экранируется, будем считать взаимодействие дырок, возникающее за счет деформаций их антиферромагнитного окружения, магнитодипольным (см. выше) и опишем его в двухчастичном приближении потенциальной энергией [27, 28]

$$V(\mathbf{r}, \alpha_1, \alpha_2) = B \cos(2\theta - \alpha_1 - \alpha_2)/r^2. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{r} — радиус-вектор, соединяющий две дырки; B — константа, связанная с модулем их эффективных дипольных моментов $|\mathbf{d}_{1,2}| = d$; θ , $\alpha_{1,2}$ — углы между направлениями \mathbf{r} , $\mathbf{d}_{1,2}$ и произвольной осью y . В дальнейшем будем считать, что $d \equiv 1$. При такой нормировке в предельном случае $J/t \ll 1$ константа B/a^2 должна быть порядка энергии обменного взаимодействия при a , равном среднему расстоянию между дырками [28]. Учитывая симметрию, направим y вдоль одного из двух возможных кристаллографических направлений — оси страйпа (см. выше). Предположим, что вектор \mathbf{d} для всех дырок

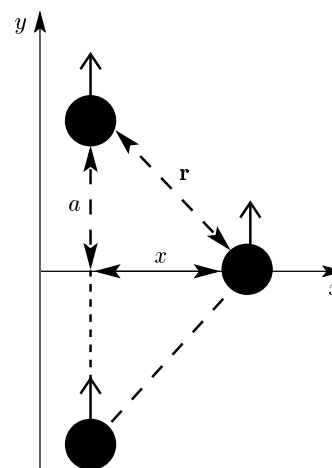


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая расчет энергии взаимодействия $V(x, a)$ дырки с ее ближайшими соседями. Стрелками показана ориентация вектора \mathbf{d}

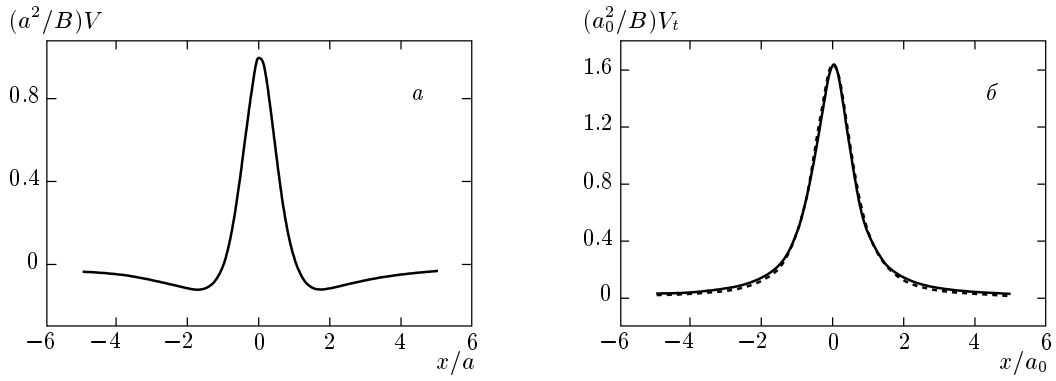


Рис. 2. Изменение потенциальной энергии $V(x, a)$ (а) и $V_t(x)$ (б) при смещении дырки по оси x : точное суммирование (сплошная линия) и аппроксимация (штрихи)

ориентирован параллельно оси y , и рассмотрим смещение одной из дырок вдоль оси x , ортогональной y (рис. 1). Спроектировав на ось x силы, действующие на эту дырку со стороны двух ближайших соседей, найдем ее потенциальную энергию

$$V(x, a) = \frac{B}{a^2} \left[1 - \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \left[1 + \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right]^{-2}, \quad (2)$$

где x и a — проекции \mathbf{r} соответственно на оси x и y . Зависимость (2) иллюстрирует рис. 2а. Считая теперь, что вектор \mathbf{d} может быть ориентирован либо по, либо против направления y и $d(y) = d(-y)$, учтем это двумя сомножителями, $d(y) = \pm 1$, и перепишем выражение для полной энергии V_t (т. е. энергии с учетом сил, действующих на рассматриваемую дырку со стороны ее более далеких соседей) в виде

$$V_t(x, a) = \sum_{j=1}^{\infty} d(0)d(ja)V(x, ja). \quad (3)$$

Здесь аргумент d фактически нумерует дырки в страйпе. Учтем теперь, что за счет тепловых флуктуаций ориентации \mathbf{d} частично разупорядочены. В том случае, когда число дырок с «неправильной» ориентацией \mathbf{d} в страйпах мало, можно воспользоваться приближением среднего поля. Для этого введем средний локальный (по y) дипольный момент $\langle d \rangle(y)$ в страйпе и будем считать, что $\langle d \rangle$ — медленная (на масштабе a) функция y . Считая теперь, что $V(x, a)$ убывает с ростом расстояния быстрее, чем меняется $\langle d \rangle$, полагая $d(y) - \langle d \rangle(y) \ll \langle d \rangle(y)$, заменив суммирование по j на интегрирование по y и разложив $\langle d \rangle(y)$ в ряд в окрестности произвольного

y , получим

$$V_t(x, y) \approx \frac{\pi^2}{6} \frac{B}{a_0^2} d(y) \times \left[\langle d \rangle(y) + a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} + \dots \right] \left[1 + \left(\frac{x}{a_0} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (4)$$

Здесь $a_0 = (6/\pi^2)a$; a_e — константа порядка магнитной корреляционной длины, связанная с конечностью радиуса взаимодействия. Рисунок 2б иллюстрирует зависимости $V_t(x, y)$, полученные суммированием (3) (сплошная линия) и по аппроксимации (4) (штрихи). Легко убедиться, что взаимодействие внутри страйпа хорошо локализовано.

В дальнейшем будем считать, что распределение страйпов по x периодически. Период L этого распределения и пространственную частоту его низшей гармоники, $q_{xm} = 2\pi/L$, будем рассматривать как внешние параметры задачи, жестко связанные с δ (и $\langle n \rangle$). Для расчета пространственного распределения потенциальной энергии $V_0(x, y)$ при произвольном распределении страйпов по оси x , воспользовавшись аппроксимацией (4), найдем сначала фурье-образ функции $V_t(x, y)$:

$$V_t(q_x, y) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} V_t(x, y) \exp(iq_x x) dx \approx \tilde{G}(y) \exp(-q_x a_0), \quad (5)$$

$$\tilde{G}(y) = G_0 d(y) \left[\langle d \rangle(y) + a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} + \dots \right],$$

$$G_0 = \frac{3}{\pi} \frac{B}{a_0 L}.$$

Здесь q_x — пространственная частота. При малых δ с учетом экранировки на расстояниях порядка

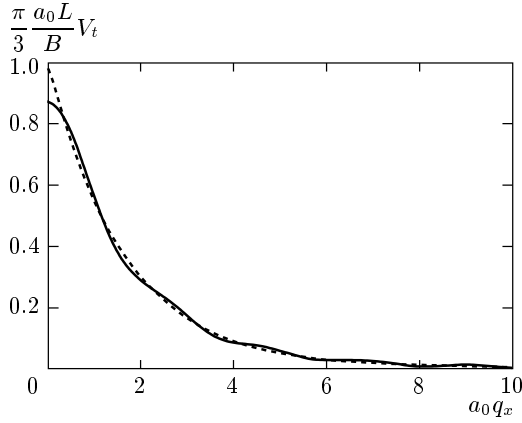


Рис. 3. Фурье-образ $V_t(q_x)$ по данным точного (сплошная линия) и приближенного (штрихи) расчетов при $L = 3a_0$

нескольких периодов ячейки пределы интегрирования в (5) могут быть расширены до бесконечности. На рис. 3а проиллюстрирован результат точного (сплошная линия) и приближенного (штрихи) расчетов $V_t(q_x, y)$ при $L = 3a_0$.

При произвольном одномерном (по x) пространственном распределении страйпов с одинаковыми распределением $\langle d \rangle(y)$ и спектральной плотностью $n(q_x)$ спектральная плотность распределения энергии $V_0(q_x, y)$ может быть записана как

$$V_0(q_x, y) = V_t(q_x, y)n(q_x) = \tilde{G}(y) \exp(-q_x a_0) n(q_x). \quad (6)$$

Отсюда после обратного фурье-преобразования (6) и перенормировки

$$\tilde{G}/E_0 \rightarrow \tilde{G}, \quad x/a \rightarrow x, \quad L/a \rightarrow L, \quad a_{0,e}/a \rightarrow a_{0,e},$$

где $E_0 = (2\pi\hbar)^2/2m_0 a^2$, m_0 — эффективная масса, стационарное уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \tilde{G}(y) \exp\left(-ia_0 \frac{d}{dx}\right) |\psi(x, y)|^2 + \varepsilon \right] \times \psi(x, y) = 0. \quad (7)$$

Здесь $\psi(x, y)$ — волновая функция дырки, ε — собственное значение оператора энергии. Оператор дифференцирования в показателе экспоненты в (7) учитывает нелокальность взаимодействия и действует на $|\psi(x, y)|^2$. Для двух систем параллельных страйпов (нижние индексы 1 и 2), у которых

$\langle d_1 \rangle(y) = -\langle d_2 \rangle(y)$, уравнение (7) трансформируется в систему

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{G}(y) \exp\left(-ia_0 \frac{d}{dx}\right) \times \left[|\psi_k(x, y)|^2 - |\psi_l(x, y)|^2 \right] + \varepsilon \right\} \times \psi_k(x, y) = 0, \quad k, l = 1, 2; \quad k \neq l. \quad (8)$$

Отметим, что для интересующих нас решений системы (8) значения ε и $\langle d_{1,2} \rangle(y)$, входящие в $\tilde{G}(y)$, должны быть согласованы с $\psi_{1,2}(x, y)$. При этом, усреднив \mathbf{d} в каждом страйпе по двум допустимым направлениям с учетом тепловых флуктуаций в локальном (по y) термодинамическом равновесии, мы должны потребовать [30], чтобы

$$\langle d_{1,2} \rangle(y) = \pm \text{th} \frac{\Delta(y)}{k_B T}. \quad (9)$$

Здесь $2\Delta(y)$ — параметр порядка (разница в энергиях взаимодействия для дырок с \mathbf{d} , направленным по и против направления $\langle \mathbf{d} \rangle(y)$ в страйпе); k_B — постоянная Больцмана; T — температура. Одновременно должно быть выполнено соотношение

$$\Delta(y) = - \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{i,j=1,2} (-1)^{i-j} \tilde{G}(y) \times \exp(-|p|q_{xm} a_0) n_i(pq_{xm}, y) n_j(-pq_{xm}, y). \quad (10)$$

В расчетах нормировка $\psi_{1,2}(x, y)$ отвечала размещению двух дырок с противоположной ориентацией \mathbf{d} на периоде L (в «элементарной ячейке») страйп-структуры [31]:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} dx dy |\psi_k(x, y)|^2 = 1, \quad k = 1, 2. \quad (11)$$

Таким образом, вероятность найти любую дырку в любом страйпе была одинакова.

При описании динамических процессов считалось, что $\langle d \rangle$ явно зависит не только от y , но и от времени t . Использовалось релаксационное приближение [31]

$$\frac{\partial \langle d \rangle(y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_d} [\langle d \rangle(y, t) - \langle d \rangle_0]. \quad (12)$$

Здесь τ_d — характерное время переворота \mathbf{d} ; $\langle d \rangle_0$ — равновесное значение $\langle d \rangle$. В явном виде динамические члены в систему (8) не включались, и эволюция $\psi_{1,2}(t)$ описывалась через зависимость $\langle d \rangle(y, t)$ в адиабатическом приближении (временной масштаб задан параметром $\tau_F = L/v_F$, где v_F — фермиевская скорость) с помощью уравнения (12).

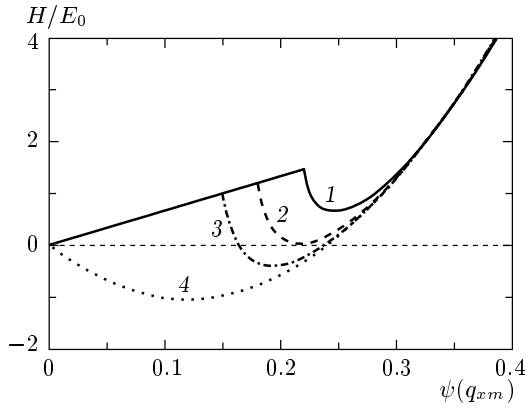


Рис. 4. Зависимость энергии H локализации дырок от $\psi(q_{xm})$ при $L = 3$, $G_0 = 4.5$ для значений T : $1.4T^*$ (1), T^* (2), $0.7T^*$ (3), 0 (4)

3. СТАЦИОНАРНЫЕ СТРАЙП-СТРУКТУРЫ

С учетом (8) запишем гамильтониан системы в виде

$$H = \sum_{q_x; i, j=1, 2; i \neq j} q_x^2 \psi_i(q_x, y) \psi_j(-q_x, y) - \tilde{G}(y) \exp(-q_x a_0) n_i(q_x, y) n_i(-q_x, y) + \tilde{G}(y) \exp(-q_x a_0) n_i(q_x, y) n_j(-q_x, y). \quad (13)$$

Тогда из неравенства Коши–Шварца [32] следует, что минимизация H происходит при

$$\psi_i(q_x, y) = \begin{cases} -\psi_j(q_x, y), & q_x = \pm q_{xm}, \pm 3q_{xm}, \dots, \\ \psi_j(q_x, y), & q_x = 0, \pm 2q_{xm}, \dots, \end{cases} \quad (14)$$

что эквивалентно требованию

$$\psi_1(x, y) = \psi_2(x \pm L/2, y). \quad (15)$$

При наличии страйп-структур должна быть хотя бы одна пространственная гармоника с амплитудой $\psi_{1,2}(q_{xm}) \neq 0$. Учитывая поэтому две низшие гармоники в $\psi_{1,2}$, запишем

$$\psi_{1,2}(x, y) = \psi_0(y) \pm \psi(q_{xm}, y) \cos(q_{xm} x). \quad (16)$$

Выражения для энергии локализации дырок, H и Δ , в этом случае примут вид

$$H(y) = \frac{2\psi^2(q_{xm}, y)}{L} \left\{ \pi^2 - 8L^2 \psi_0^2(y) \times \left[\langle d \rangle(y) + a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} + \dots \right] \times G_0 \exp(-q_{xm} a_0) \right\}, \quad (17)$$

$$\Delta(y) = 8L^2 \psi_0^2(y) \psi^2(q_{xm}, y) \times \left[\langle d \rangle(y) + a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} + \dots \right] \times G_0 \exp(-q_{xm} a_0). \quad (18)$$

Используя теперь соотношения (9), (11), (17) и (18), можно рассчитать зависимость H (ширины псевдощели в спектре состояний) от $\psi(q_{xm})$ в состоянии термодинамического равновесия ($\psi_0(y) = \psi_0$, $\psi(q_{xm}, y) = \psi(q_{xm})$), рис. 4. Из рис. 4 видно, что имеется область значений параметров, в которой при $T < T^* = \text{const}$ минимизация H происходит при $\psi(q_{xm}) \neq 0$. Критическая температура T^* и определяет точку перехода, связанного с формированием страйп-структур. Зависимость $\psi(q_{xm})$ от H неоднозначна, и при «быстром» изменении T возможно возбуждение метастабильных состояний (см. ниже).

Более строгий расчет с учетом шести первых гармоник фурье-разложения $\psi_{1,2}(x)$ проводился численно. Для нахождения $\psi_{1,2}(x)$ строился вспомогательный гамильтониан

$$H' = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{i, j=1, 2} [(pq_{xm})^2 \psi_i(pq_{xm}) \psi_j(-pq_{xm}) - \langle d \rangle_i (-1)^{i-j} G_0 \times \exp(-|p|q_{xm} a_0) n_i(pq_{xm}) n_j(-pq_{xm})] + M \exp \left\{ R [Ln_i(0) - 1]^2 \right\}, \quad (19)$$

$$\langle d \rangle_i = \text{th} \left[\frac{\langle d \rangle_i}{k_B T} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{i, j=1, 2} (-1)^{i-j} G_0 \times \exp(-|p|q_{xm} a_0) n_i(pq_{xm}) n_j(-pq_{xm}) \right],$$

минимизация которого проводилась с использованием неограниченного симплекс-метода [33] и обеспечивала правильную нормировку $\psi_{1,2}(x)$ при $R \rightarrow \infty$. Параметры M и R выбирались так, что погрешность последней была менее 1%. Энергия связи определялась подстановкой найденных $\psi_{1,2}(x)$ в (13). Расчетную зависимость $T^*(L^{-2})$ иллюстрирует рис. 5а. Область существования страйп-структур ограничена предельным значением δ_m , для которого $T^* = 0$. На зависимости $T^*(L^{-2})$ имеется участок почти линейного роста T^* с уменьшением L^{-2} (т. е. δ). Волновые функции $\psi_{1,2}(x)$ сильно ангармоничны (рис. 5б). Ширина соответствующей энергетической щели с ростом T монотонно убывает, обращаясь в нуль при $T = T^*$ (рис. 5в). Это является косвенным призна-

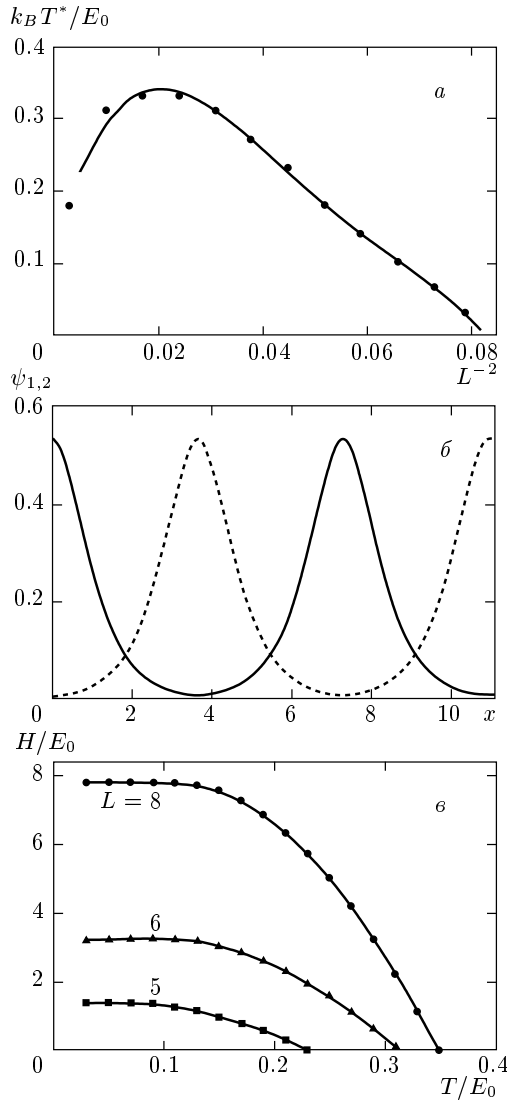


Рис. 5. а) Расчетная зависимость T^* от L^{-2} (точки) и ее аппроксимация полиномом четвертой степени (сплошная линия), б) волновые функции $\psi_{1,2}(x)$ (сплошная и штриховая линии) при $L = 7.5$ и в) температурная зависимость ширины псевдоцелли при $L = 5, 6$ и 8 ; $G_0 = 4.5$

ком того, что точка $T = T^*$ является точкой фазового перехода второго рода.

4. СОСУЩЕСТВОВАНИЕ ФАЗ

Будем считать, что $\langle d \rangle(y) \neq \text{const}$, и проварьируем $\psi(q_x, y)$ (см. (16)) с учетом члена, пропорционального $d^2 \langle d \rangle(y) / dy^2$, постоянно отслеживая положение точки локального экстремума. Легко показать, что

минимизация H происходит при

$$\psi(q_{xm}, y) = \frac{1}{2L} \left(1 - \frac{\gamma}{P} \right), \quad (20)$$

где

$$\gamma = \frac{1}{4g} = \frac{\pi^2}{4LG_0 \exp(-q_{xm} a_0)},$$

$$P = \langle d \rangle(y) + a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} + \dots$$

При этом

$$\Delta(y, P) = \frac{G_0 P}{L} \left[1 - \left(\frac{\gamma}{P} \right) \right]^2 \exp(-q_{xm} a_0). \quad (21)$$

Подставив (21) в (9) и линеаризовав полученное уравнение по P , с учетом самосогласованности задачи получим замкнутое уравнение

$$a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle(y)}{dy^2} = E_b(T) \text{Arth}[\langle d \rangle(y)] + \gamma - \langle d \rangle(y), \quad (22)$$

$$E_b(T) = \frac{k_B T L}{2G_0 \exp(-q_{xm} a_0)},$$

которое в рамках механической аналогии можно интерпретировать как уравнение движения в потенциале

$$U(\langle d \rangle) = -E_b(T) \left[\langle d \rangle \text{Arth}(\langle d \rangle) + \frac{1}{2} \ln(1 - \langle d \rangle^2) \right] - \gamma \langle d \rangle + \frac{1}{2} \langle d \rangle^2. \quad (23)$$

Характер последнего иллюстрирует рис. 6а. При $T = T^*$ оба максимума потенциальной кривой $U(\langle d \rangle)$ имеют одинаковые значения. В рассматриваемом нами случае система консервативна и все процессы в ней протекают с сохранением энергии.

Остановимся теперь на простейшем примере неоднородных (по y) решений типа «переключения фаз». Будем считать, что на двух бесконечно удаленных (по y) сторонах купратной плоскости

$$\langle d \rangle(y) \Big|_{y \rightarrow -\infty} = \langle d \rangle_1, \quad \langle d \rangle(y) \Big|_{y \rightarrow +\infty} = \langle d \rangle_2 \neq \langle d \rangle_1.$$

Нас будет интересовать граница раздела между этими двумя областями — «фазами». Из рис. 6а следует, что при $T < T_m = \text{const} > T^*$ на кривых $U(\langle d \rangle(y))$ имеются два локальных экстремума. Первый из них, U_1 , локализован в точке $\langle d \rangle = 0$ при любом T , а положение $\langle d \rangle = \langle d \rangle_r$ второго экстремума U_2 меняется при изменении T , причем $U_1 < U_2$ при $T^* < T < T_m$ и $U_1 > U_2$ при $T < T^*$. При $T = T^*$ энергии фаз одинаковы, $U_1 = U_2$, и реализуемы решения с асимптотическим,

$$\frac{d \langle d \rangle(y)}{dy} \Big|_{y \rightarrow \pm \infty} = 0, \quad (24)$$

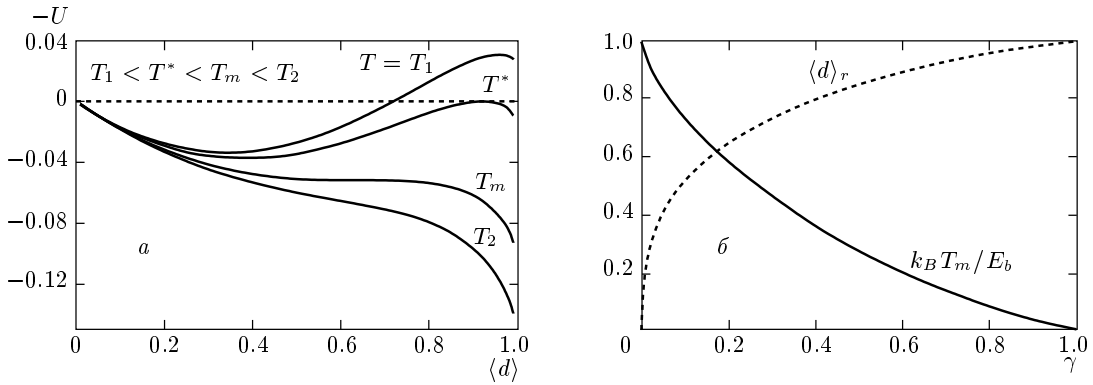


Рис. 6. Расчетные зависимости а) $U(\langle d \rangle)$ для нескольких значений T ; б) $T_m(\gamma)$ и $\langle d \rangle_r(\gamma)$ в точке $T = T_m$

переходом от одного «равновесного» значения $\langle d \rangle_1 = 0$ ко второму $\langle d \rangle_2 = \langle d \rangle_r$. Условие сосуществования однородных (в нашем по y) фаз известно как правило Максвелла [34].

Приближенную оценку ширины области перехода можно получить аналитически, так как решение уравнения (22) при условии (24) может быть записано в квадратурах:

$$\zeta - \zeta_0 = \int_0^{\langle d \rangle_r} d\langle d \rangle \left\{ E_b(T^*) \left[\langle d \rangle \operatorname{Arth} \langle d \rangle + \frac{1}{2} \ln(1 - \langle d \rangle^2) \right] + \gamma \langle d \rangle - \frac{1}{2} \langle d \rangle^2 \right\}^{-1/2}, \quad (25)$$

где $\zeta = y/a_e$, $\zeta_0 = \text{const}$. Разложив подынтегральную функцию в ряд и ограничившись квадратичными членами при $E_b(T^*) \ll 1$, получим

$$\langle d \rangle(\zeta) = \frac{1}{2} \frac{\gamma}{1 - E_b(T^*)} \times \left\{ \sin \left[\sqrt{1 - E_b(T^*)} (\zeta - \zeta_0) \right] + 1 \right\}. \quad (26)$$

Отсюда для ширины области перехода имеем оценку

$$\Delta y = \frac{\pi a_e}{\sqrt{1 - E_b(T^*)}}. \quad (27)$$

Очевидно, что полученное нами неоднородное решение инвариантно относительно произвольного сдвига $y \rightarrow y + \delta y$ ($\delta y = \text{const}$) координат вдоль оси y .

5. МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И КИНЕТИКА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Второй максимум на потенциальной кривой рис. 6а исчезает при температуре $T = T_m$, соответ-

ствующей одновременному выполнению условий

$$\frac{\partial U(\langle d \rangle, T_m)}{\partial \langle d \rangle} = 0, \quad \frac{\partial^2 U(\langle d \rangle, T_m)}{\partial \langle d \rangle^2} = 0. \quad (28)$$

Расчетную зависимость $T_m(\gamma)$ иллюстрирует рис. 6б. Легко убедиться, что $T_m > T^*$. Остановимся на ситуации, когда $T^* \neq T < T_m$ и граница раздела фаз подвижна. По-прежнему будем считать, что $\langle d \rangle(y)|_{y \rightarrow -\infty} = 0$ и $\langle d \rangle(y)|_{y \rightarrow +\infty} = \langle d \rangle_r$, а область перехода будем описывать профилем волны переключения фаз $\langle d \rangle(y, t) = \langle d \rangle(\xi)$, движущейся вдоль оси y с постоянной скоростью v . Здесь $\xi = y - vt$ — бегущая координата. Проведя теперь аналогичные преобразования и воспользовавшись равенством (12), получим уравнение

$$a_e^2 \frac{d^2 \langle d \rangle}{d\xi^2} = E_b(T) \operatorname{Arth} \left(\langle d \rangle - \tau_d v \frac{d\langle d \rangle}{d\xi} \right) + \gamma - \langle d \rangle, \quad (29)$$

которое при $v = 0$ переходит в (22). Это значит, что при $T = T^*$ волна переключения неподвижна. Поскольку в рамках механической аналогии член, пропорциональный v , отвечает за нелинейное «трение», при $T \neq T^*$ сосуществование фаз невозможно. Этот вывод согласуется с тем, что для развития волны переключения в распределенных системах необходима начальная затравка — флуктуация с характерными размерами порядка ширины области перехода [35, 36]. Скорость волны v зависит от величины управляющего параметра (в нашем случае T). В критической точке $v = 0$ и скорость меняет знак.

Уравнение (29) решалось численно. Вторая производная по y аппроксимировалась конечными разностями второго порядка. Использовался метод Рунге–Кутты шестого порядка с переменным шагом по t . Рассматривалась эволюция начального состояния $\langle d \rangle = 1$ с возмущением гипергауссовского

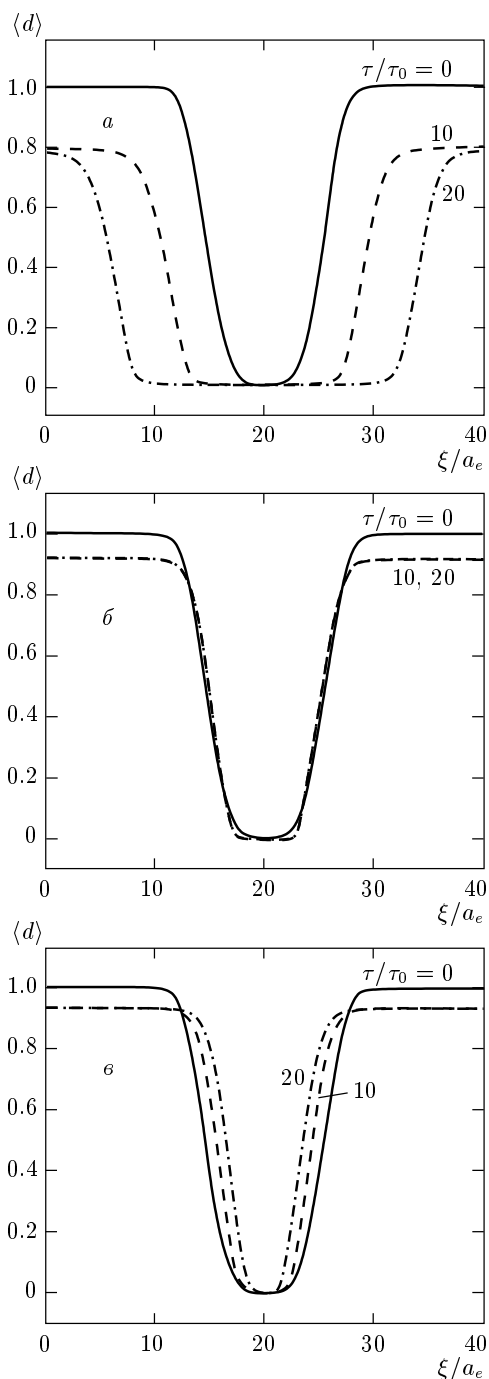


Рис. 7. Временная эволюция начальной флуктуации $\langle d \rangle$ при $T/T^* = 1.22$ (а), 1.00 (б) и 0.96 (в); $g = 1.25$

пространственного профиля. Рисунок 7а иллюстрирует эволюцию широкой (по сравнению с Δy) начальной флуктуации при $T > T^*$. Система быстро переходит в метастабильное состояние $\langle d \rangle = \langle d \rangle_r$, и лишь затем формируется волна переключения

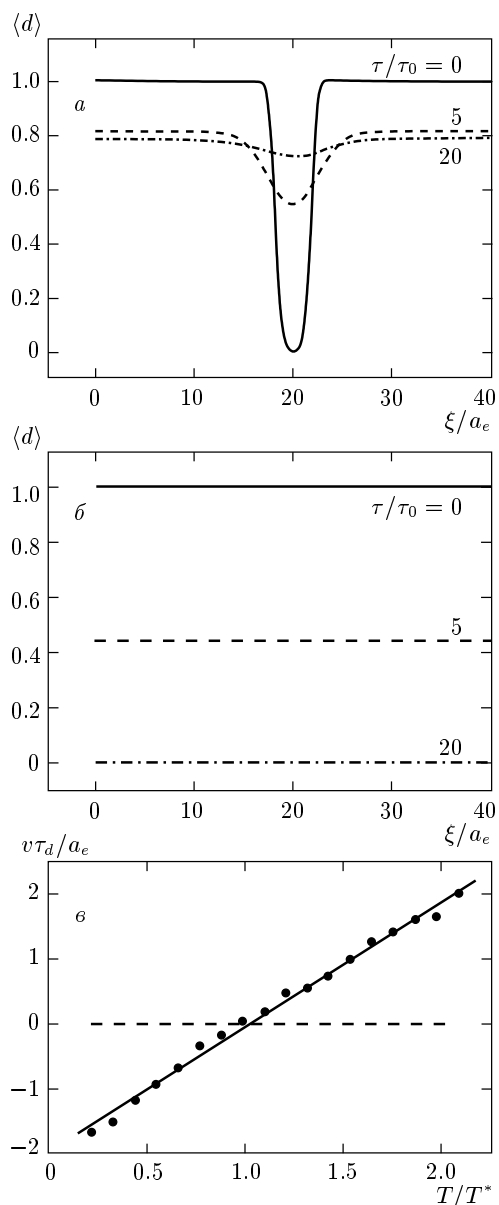


Рис. 8. а) Рассасывание узкой флуктуации $\langle d \rangle$ при $T/T^* = 1.22$; б) сценарий фазового перехода при $T > T_m$; $T/T^* = 1.57$; в) зависимость v от T/T^* ; $g = 1.25$

к стабильной фазе $\langle d \rangle = 0$. С ростом T величина $\langle d \rangle_r$ уменьшается. При $T = T^*$ (рис. 7б) и $T < T^*$ (рис. 7в) также сначала происходит переход в метастабильное состояние $\langle d \rangle = \langle d \rangle_r$, после чего флуктуация либо замораживается (формируется стационарная, $v = 0$, граница раздела фаз), либо рассасывается ($v < 0$). Узкая (по сравнению с Δy) флуктуация рассасывается даже при

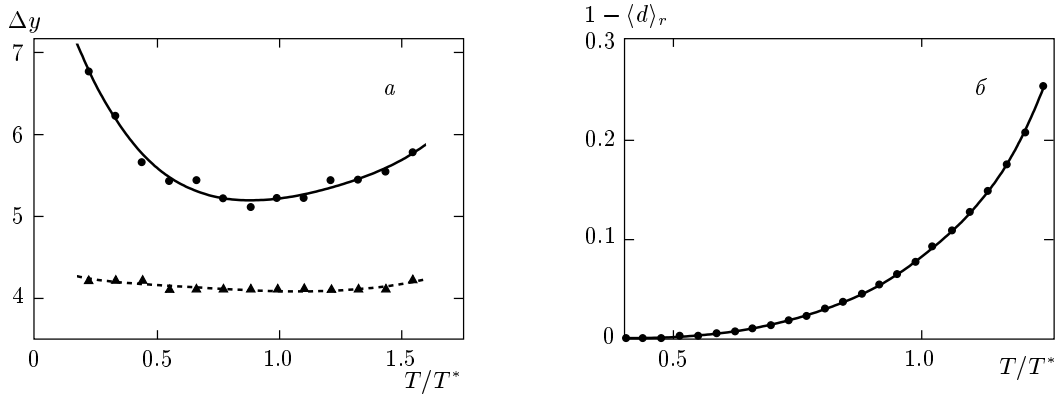


Рис. 9. а) Температурная зависимость ширины области перехода Δy при $g = 1.25$ (сплошная линия) и 0.56 (штрихи) и б) зависимость $1 - \langle d \rangle_r$ от T/T^* при $g = 1.25$

$T > T^*$ (рис. 8а). При $T > T_m$ система из неустойчивого состояния $\langle d \rangle \neq 0$ всегда сразу переходит в состояние $\langle d \rangle = 0$ (рис. 8б). Скорость v линейно зависит от T/T^* , меняя знак в точке $T = T^*$ (рис. 8в).

Таким образом, если при $T = T^*$ две фазы могут сосуществовать (рис. 7б), то при $T < T^*$ ($v < 0$) затравка страйп-структуры может расширяться за счет вовлечения в процесс самоорганизации дырок из областей с еще неустановившимся порядком (рис. 7а). Считая, что в страйпе упорядочены векторы \mathbf{d} примерно для 10^2 дырок и $\tau_d \sim 10^{-12} - 10^{-13}$ с, получим оценку для времени распространения волны переключения $\tau \sim 0.1 - 1.0$ нс. Однако, для того чтобы такая волна начала распространяться, затравка страйпа должна иметь размеры, превышающие Δy (см. рис. 7а и 8а). Рисунок 9а иллюстрирует расчетную зависимость $\Delta y(T/T^*)$ (по уровню 0.9 от высоты фронта) при $g = 1.25$ (сплошная линия) и 0.56 (штрихи). Определив поэтому минимальный размер затравки (фактически, число дырок с упорядоченными векторами \mathbf{d}) как $\Delta y \sim 4 - 6$, получим вероятностную оценку времени τ_f формирования соответствующей начальной флуктуации:

$$\tau_f = \frac{\tau_d}{(1 - \langle d \rangle_r)^{\Delta y - 1}}. \quad (30)$$

Отсюда следует, что при $T/T^* \approx 1.25$, когда $1 - \langle d \rangle_r \approx 0.25$ (см. рис. 9б), $\tau_f \sim 1.0$ нс $\gg \tau_d$.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, постулировав, что страйп-структуры в купратных плоскостях оксидных ВТСП одномерны,

периодичны и формируются за счет сил магнитодипольного (нелокального спин-волнового, см. выше) взаимодействия, мы построили простую феноменологическую модель, описывающую процессы соответствующей самоорганизации. При разумном значении $G_0 \sim 100$ мэВ построенная модель предсказывает период таких структур в несколько нанометров. Уровень легирования, при котором они могут формироваться, оказывается ограниченным сверху значением $\langle n \rangle_{max} \approx 0.125$, которое согласуется с данными эксперимента. Критическая температура существования таких структур также находится вблизи известной из множества экспериментов температуры $T^* \sim 150$ К. Более того, следующая из нашей модели зависимость $T^*(\langle n \rangle)$ имеет выраженный линейный участок при $\langle n \rangle < \langle n \rangle_{max}$, тоже уже наблюдавшийся экспериментально. Как это ни удивительно, и рассчитанная нами ширина соответствующей энергетической щели, и ее температурная зависимость хорошо согласуются с данными, полученными методом ARPES, для псевдощели в купратах. Предположим на этом основании, что именно эта щель и является псевдощелью, тогда наиболее важным для нас при интерпретации данных экспериментов [23, 37, 38] по оптической диагностике кинетики фазового перехода в ВТСП станет то, что во всех этих экспериментах изучались образцы с оптимальным (по T_c) уровнем легирования δ_{opt} . Из данных работы [12] следует, что в [23, 37, 38] был реализован случай $T_c \approx T^*$, и состояния со сверхпроводящей щелью и псевдощелью были неразличимы. При быстром разогреве исходно сверхпроводящих образцов до температур $T > T_c$ сверхпроводимость во всех этих экспериментах должна была раз-

рушаться практически мгновенно [25]. Однако, поскольку сам разогрев был сравнительно невелик и $T^* < T < T_m \approx (1.4-1.5)T^*$, в купратных плоскостях исследуемых образцов еще достаточно долго (в течение 1 нс и более, см. выше) должны были существовать метастабильные страйп-структуры. В течение всего этого интервала времени зондирование по схеме эксперимента из [23] должно было обнаруживать энергетическую щель, а по схеме из [37, 38] — хорошо «помнить» о начальном (сверхпроводящем либо несверхпроводящем) состоянии диагностируемого образца.

В заключение авторы хотят выразить самую искреннюю признательность В. И. Емельянову за плодотворные дискуссии, способствовавшие выполнению настоящей работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 00-15-96726), а также ГНТП «Фундаментальная метрология» и «Физика квантовых и волновых явлений».

ЛИТЕРАТУРА

1. J. G. Bendnorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
2. A. Fujimori, E. Takayama-Muromachi, and Y. Uchida, *Sol. St. Comm.* **63**, 857 (1987).
3. J. Fink, N. Nucker, E. Pellegrin et al., *J. Electr. Spectr. & Rel. Phen.* **66**, 395 (1994).
4. Z. Schlesinger, L. D. Rotter, R. T. Collins et al., *Physica C* **185-189**, pt. 1, 57 (1991).
5. R. J. Birgeneau and G. Shirane, in *Physical Properties of High Temperature Superconductors I*, ed. by D. M. Ginsberg, World Scientific, Singapore (1989), p. 151.
6. J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, C. Vettier et al., *Physica C* **185-189**, pt. 1, 86 (1991); J. M. Tranquada, P. M. Gehring, G. Shirane et al., *Phys. Rev. B* **46**, 5561 (1992).
7. G. Shirane, *Physica C* **185-189**, pt. 1, 80 (1991).
8. M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, T. R. Thurston et al., *Phys. Rev. B* **38**, 6636 (1988).
9. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, под ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница, Наука, Москва (1977).
10. J. F. Annett, N. Goldenfeld, and A. J. Leggett, *J. Low Temp. Phys.* **105**, 473 (1996).
11. A. Moreo, A. Nazarenko, S. Haas et al., *J. Phys. Chem. Sol.* **56**, 1645 (1995).
12. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria et al., *Nature* **392**, 157 (1998).
13. V. V. Kabanov, J. Demsar, B. Podobnik et al., *Phys. Rev. B* **59**, 1497 (1999).
14. J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe et al., *Nature* **375**, 561 (1995).
15. B. Buchner, M. Breuer, A. Freimuth et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1841 (1994).
16. J. L. Cohn and J. Karpinski, *Phys. Rev. B* **58**, 14617 (1988).
17. G. Baskaran, Z. Zou, and P. W. Anderson, *Sol. St. Comm.* **63**, 973 (1987).
18. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
19. W. O. Putikka, M. U. Luchini, and T. M. Rice, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 538 (1992).
20. M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, M. Schluter et al., *Phys. Rev. B* **41**, 11068 (1990).
21. K. Yonemitsu, A. R. Bishop, and J. Lorenzana, *Phys. Rev. B* **47**, 12059 (1993).
22. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, ed. by K. Binder, Springer, Berlin (1986).
23. A. N. Zherikhin, V. A. Lobastov, V. M. Petnikova, and V. V. Shuvalov, *Phys. Lett. A* **179**, 145 (1993); *Physica C* **221**, 311 (1994).
24. *Nonequilibrium Superconductivity*, ed. by D. N. Langenberg and A. I. Larkin, North-Holland, Netherlands (1986).
25. N. Bluzer, *Phys. Rev. B* **44**, 10222 (1991).
26. B. P. Stojkovic, Z. G. Yu, A. L. Chernyshev et al., E-print archives cond-mat/9911380.
27. D. M. Frenkel and W. Hanke, *Phys. Rev. B* **42**, 6711 (1990).
28. B. I. Shraiman and E. D. Siggia, *Phys. Rev. B* **40**, 9162 (1989).
29. D. I. Khomskii and K. I. Kugel, E-print archives cond-mat/0103317.
30. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1995).
31. А. Анималу, *Квантовая теория кристаллических твердых тел*, Мир, Москва (1981).

- 32.** Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров: определения, теоремы, формулы*, под ред. И. Г. Арамановича, Наука, Москва (1970).
- 33.** J. A. Nelder and R. Mead, *Computer J.* **7**, 308 (1965).
- 34.** Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
- 35.** Н. Н. Розанов, *Оптическая бистабильность и гистерезис в распределенных нелинейных системах*, Наука, Москва (1997).
- 36.** В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, *Автоволновые процессы*, Наука, Москва (1987).
- 37.** М. Е. Гершензон, В. В. Головлев, И. Б. Кедич и др., *Письма в ЖЭТФ* **152**, 1189 (1990); S. V. Chekalin, V. M. Farztdinov, V. V. Golovlyov et al., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3860 (1991).
- 38.** A. S. Kazeroonian, T. K. Cheng, S. D. Brorson et al., *Sol. St. Comm.* **78**, 95 (1991).