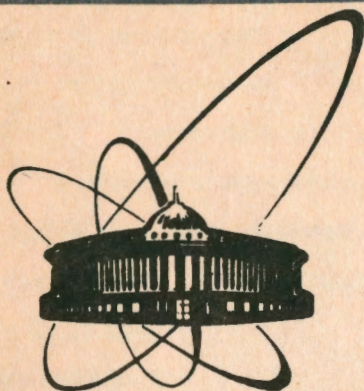


92-558



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-92-558

Ж.Ковачевич\*, Н.М.Плакида

О ВЛИЯНИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ  
НА ШИРИНУ ПЕРЕХОДОВ  $4f$ -ЭЛЕКТРОНОВ  
В ТМ-УВСО-СОЕДИНЕНИЯХ

Направлено в «Письма в ЖЭТФ»

---

\*Факультет естественных наук и математики  
Университета Черногории, Подгорица, Югославия

1992

О влиянии спиновых флуктуаций на ширину переходов  
4*f*-электронов в Тм-*YBCO*-соединениях

Исследуется *S-F*-взаимодействие редкоземельного иона  $Tm^{3+}$  со спинами меди в Тм-*YBCO*-соединениях. Получено выражение для ширины линии переходов в кристаллическом электрическом поле для  $Tm^{3+}$ . Показано, что динамические спиновые флуктуации в  $CuO_2$  дают основной вклад в уширение линии.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1992

Перевод авторов

Kovačević Ž., Plakida N.M.

P17-92-558

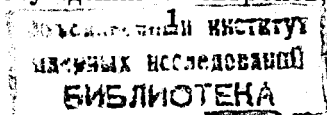
About the Influence of Spin Fluctuations on the Transition  
Linewidth of 4*f*-electrons in Tm-*YBCO*-Compounds

We investigate the *S-F*-interaction of the rare-earth ion  $Tm^{3+}$  with copper spins in Tm-*YBCO*-compounds. The expression for the linewidth of the crystal electrical field transition is obtained. It is shown that dynamical spin fluctuations in  $CuO_2$  give the main contribution to the line broadening.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

В недавних экспериментах<sup>1,2</sup> по неупругому рассеянию нейтронов была исследована температурная зависимость ширины переходов между основным  $\Gamma_3^{(1)}$  и первыми возбужденными уровнями  $\Gamma_4^{(1)}$  и  $\Gamma_2^{(1)}$  кристаллического электрического поля (КЭП) для ионов  $\text{Tm}^{3+}$  в высокотемпературном сверхпроводнике  $\text{Tm}_{0.1}\text{Y}_{0.9}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$  ( $\text{Tm-YBCO}_{6.9}$ ) при энергиях 11.8 мэВ и 14.2 мэВ соответственно. Было замечено резкое уменьшение ширины линий при температурах  $T_S \simeq T_c + 20 \text{ K}$  ( $T_c = 92 \text{ K}$ ) для обоих переходов. В работе<sup>2</sup> эта зависимость для перехода между основным и первым возбужденным уровнем при энергии  $\delta = 13.8 \text{ мэВ}$  для несверхпроводящего соединения  $\text{Tm-YBCO}_{6.1}$  была аппроксимирована выражением  $\Gamma \propto \text{Im}\chi(\delta) \cdot \coth\left(\frac{\delta}{2kT}\right)$  в предположении, что мнимая часть магнитной восприимчивости  $\chi$  не зависит от температуры. Из экспериментальных данных видно, что значения ширины линии  $\Gamma$  для  $\text{Tm-YBCO}_{6.9}$  при всех температурах меньше, чем соответствующая ширина для  $\text{Tm-YBCO}_{6.1}$ . Это указывает на то, что ферми-жидкостный вклад в релаксацию магнитных возбуждений f-ионов  $\text{Tm}^{3+}$  в КЭП мал.

Вследствие наличия дальнего антиферромагнитного (АФ) упорядочения спинов на узлах  $\text{Cu}2$  можно ожидать, что главный источник уширения в  $\text{Tm-YBCO}_{6.1}$  связан со спин-спиновым взаимодействием f-электронов и АФ-спиновых волн. При увеличении концентрации дырок в слое  $\text{CuO}_2$  и их делокализации значительно уменьшается магнитная корреляционная длина, дальний порядок исчезает, но сохраняются сильные АФ-корреляции спинов в сверхпроводящей и металлической фазах<sup>4-6</sup>. Поэтому можно ожидать, что флуктуации спинов в плоскостях  $\text{CuO}_2$  обеспечивают основной канал релаксации возбуждений f-электронов, приводя к уширению



линии КЭП в  $Tm-YBCO_{6,9}$ . В настоящей работе вычисляется температурная зависимость ширины линий возбуждений в КЭП, обусловленных динамическими спиновыми флуктуациями в  $YBCO_{6,9}$ .

## 1. Модель

Учитывая результаты экспериментов<sup>4</sup> ядерного магнитного резонанса (ЯМР), рассмотрим модель АФ ферми-жидкости, в которой на каждом узле  $Cu_2$  находится спин  $S=1/2$ .

Представим гамильтониан редкоземельных (РЗ) ионов и спинов  $S=1/2$  на узлах меди в виде:

$$H = H_{CEF} + H_{t-J} + H_{S-F} \quad (1)$$

$$H_{CEF} = \sum_{n,i} \omega_n K_{nn,i}, \quad (2)$$

где  $K_{mn,i} = (|m\rangle\langle n|)_i$ -операторы перехода для  $n, m$  уровней КЭП,

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + J \sum_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (3)$$

гамильтониан  $t - J$  модели, описывающей дырки  $\hat{c}_{i\sigma}^+ = c_{i\sigma}^+(1 - n_{i,-\sigma})$  в плоскости  $CuO_2$  и взаимодействие спинов  $\vec{S}_i$  в узлах меди,

$$H_{S-F} = - \sum_{i,j} I_{S-F}^\alpha J_i^\alpha S_j^\alpha, \quad (4)$$

где  $\vec{J}_i$  - оператор полного момента иона  $Tm^{3+}$  в узле  $i$ ,  $\vec{S}_j$  - оператор спина на ближайших к нему узлах меди  $j$ ,  $I_{S-F}^\alpha$  - константа связи косвенного обмена. Отметим, что гамильтониан S-F-взаимодействий (4) имеет форму, близкую к гамильтониану взаимодействия электронов проводимости с 4f-электронами (см.<sup>3,7</sup>).

При использовании техники дифференцирования по двум временам в методе уравнений движения для двухвременных функций

Грина  $\langle\langle J_i^-(t) | J_{i'}^+(t') \rangle\rangle$  нетрудно получить массовый оператор  $\sum_i(\omega)$  уравнения Дайсона. Ширина уровня  $\Gamma_i(\omega)$  определяется мнимой частью массового оператора:

$$\Gamma_i(\delta) = - \coth \left( \frac{\delta}{2kT} \right) \text{Im} \left\{ \sum_i(\delta + i\epsilon) \right\}, \quad (5)$$

где

$$\sum_i(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{j,j'} \tilde{I}_{ij} \langle\langle S_j^- | S_{j'}^+ \rangle\rangle_\omega \tilde{I}_{ij'}, \quad (6)$$

где суммирование проводится по узлам меди  $jj'$  в соседних плоскостях  $CuO_2$ , а

$$\tilde{I}_{ij} = \tilde{I}(i-j) \propto I_{S-F}^{xz} \approx I_{S-F}^{yy}.$$

Переходя к q-представлению, находим:

$$\Gamma(\delta) \propto \coth \left( \frac{\delta}{2kT} \right) \sum_{\vec{q}} [F(\vec{q})]^2 \cdot \text{Im} \left\{ \chi^{-+}(\vec{q}, \delta) \right\}, \quad (7)$$

где

$$F(\vec{q}) = 8 \cos \left( \frac{aq_x}{2} \right) \cos \left( \frac{bq_y}{2} \right) \cos \left( \frac{cq_z}{6} \right) \quad (8)$$

- формфактор<sup>4</sup>, который учитывает локальную симметрию иона  $Tm^{3+}$  в элементарной ячейке  $TmBa_2Cu_3O_7$  с постоянными решетки  $a, b, c$ ,

$$\text{Im} \left\{ \chi^{-+}(\vec{q}, \omega) \right\} \equiv \chi''_{-+}(\vec{q}, \omega) = - \langle\langle S^- | S^+ \rangle\rangle_{\vec{q}, \omega} \quad (9)$$

- мнимая часть фурье-компоненты комплексной обобщенной восприимчивости, связанной с соответствующей запаздывающей функцией Грина.

В недавних работах<sup>5</sup> была измерена температурная зависимость мнимой части магнитной восприимчивости для  $YBCO_{6,92}$  вблизи АФ волнового вектора

$\vec{Q}_{AF} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1.6)$  и при энергии  $\hbar\omega = 10$  мэВ. Эту зависимость

можно аппроксимировать с хорошей точностью при  $T > 75K$  выражением

$$\chi''(\omega, T) \simeq a \cdot (T - 75)^b \cdot \exp [c(T - 75)], \quad (10)$$

где параметры имеют значения

$$a = 1.22 K^{-b}, \quad b = 1.148 \quad \text{и} \quad c = -0.017 K^{-1}.$$

Так как в экспериментах измеряется усредненная по векторам  $\vec{q}$  вблизи  $\vec{Q}_{AF}$  спиновая восприимчивость, мы можем предположить, что температурная зависимость сумм по  $\vec{q}$  в (7) будет соответствовать зависимости (10), т.е.

$$\sum_{\vec{q}} [F(\vec{q})]^2 \cdot \text{Im} \{ \chi^{-+}(\vec{q}, \delta) \} \propto \chi''(\omega, T). \quad (11)$$

Предполагая, что в ширину линии входит постоянный вклад  $\Gamma_0$ , не обусловленный динамическими спиновыми флуктуациями, получаем следующее выражение для ширины линии

$$\Gamma(T) = \Gamma_0 + A \cdot \coth \left( \frac{\delta}{2kT} \right) \chi''(\omega, T), \quad (12)$$

где при подгонке (12) к экспериментальным данным<sup>2</sup> получены значения параметров

$$\Gamma_0 = 0.187 \text{ мэВ} \quad \text{и} \quad A = 0.172 \cdot 10^{-2} [ \text{в соот.ед.} ].$$

На рис. 1 представлены экспериментальные результаты ширины линии при переходе  $\Gamma_3^{(1)} \rightarrow \Gamma_4^{(1)}$  с энергией  $\delta = 11.8$  мэВ в  $Tm-YBCO_{6.9}$  (точки). Пунктирная кривая соответствует зависимости  $\coth \left( \frac{\delta}{2kT} \right)$ , а сплошная кривая - результаты расчета (12).

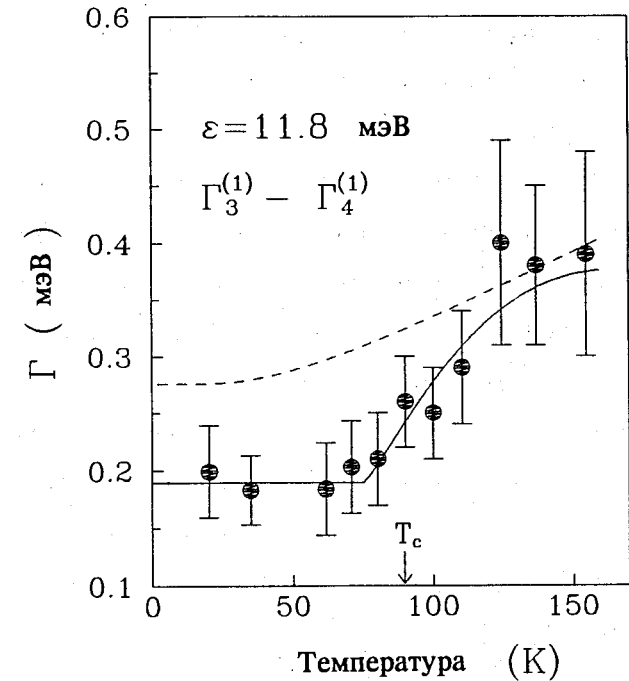


Рис.1.

Температурная зависимость ширины перехода между основным  $\Gamma_3^{(1)}$  и первым возбужденным уровнем  $\Gamma_4^{(1)}$  при энергии  $\varepsilon = 11.8$  мэВ иона  $Tm^{3+}$  в  $Tm-YBCO_{6.9}$ : экспериментальные результаты - точки, сплошная кривая - теория, пунктирная кривая - зависимость  $\Gamma_0 \cdot [1 + \coth \left( \frac{\varepsilon}{2kT} \right)]$

Резкое уменьшение ширины линии наблюдается и в  $Tm_{0.1}Y_{0.9}Ba_2(Cu,Zn)_3O_{6.9}$  при температуре  $T_S \simeq T_c + 20$  K, где  $T_c = 50$  K при концентрации Zn 5%.

Таким образом, предложенная модель позволяет объяснить температурную зависимость ширины линий перехода для 4f-электронов в КЭП. Резкое уменьшение ширины линий при  $T_S \simeq T_c + 20$  K  $>$   $T_c$  указывает на существенный вклад в уширение линий динамиче-

ских спиновых флуктуаций, которые имеют при температуре  $T_S$ , согласно ЯМР-экспериментам<sup>6</sup>, максимальное значение. Этим данные вещества отличаются от традиционных металлов, например<sup>3</sup>  $Tb_xLa_{1-x}Al_2$ , где уменьшение ширины линии происходит при  $T = T_c$  в связи с образованием сверхпроводящей щели  $2\Delta < \delta_{CF}$ .

Более последовательный расчет ширины линии (7) с использованием аналитических выражений для  $\chi''(\vec{q}, \omega)$  в рамках  $t-J$  модели предполагается провести в отдельной работе.

Один из авторов (К.Ж.) благодарит дирекцию ОИЯИ за гостеприимство и сотрудников ЛТФ ОИЯИ за полезные обсуждения.

- 
1. Е.А. Горемычкин, Р. Осборн, А.Д. Тейлор, Письма в ЖЭТФ **50**, 351 (1989).
  2. R. Osborn and E.A. Goremychkin, Physica C **185-189**, 1179 (1991).
  3. P.Fulde, M.Loewenhaupt, Adv. in Phys. **34**, 589 (1986).
  4. M.Takigawa et al., Phys.Rev. B **43**, 247 (1991);  
A.J.Millis, H. Monien and D.Pines, Phys.Rev. B **42**, 167 (1990).
  5. J.Rossat-Mignod et al., Physica C **185-189**, 86 (1991);  
J.Rossat-Mignod et al., Physica B **180-181**, 383 (1992).
  6. C.Berthier et al., Physica C **185-189**, 1141 (1991).
  7. В.Л.Аксенов, Е.А. Горемычкин и Т.Фрауенхайм, Физика металлов и металловедение **55**, 496 (1983)

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 декабря 1992 года.