Физика низких температур, 1995, т. 21, № 8, с. 792–804 УДК 537.312.62; 538.945

К теории взаимодействия делокализованных носителей заряда с магнитными возбуждениями в высокотемпературных сверхпроводниках

В. М. Локтев

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Украина, 252143, г. Киев, ул. Метрологическая, 14-б

В. А. Стефанович

Институт физики полупроводников НАН Украины, Украина, 252028, г. Киев, пр. Науки, 45

Статья поступила в редакцию 14 февраля 1995 г., после переработки 31 марта 1995 г.

Исходя из представления о существовании в купратных слоях высокотемпературных сверхпроводников магнитных топологических солитонов (вихрей) выполнен расчет энергий связанных состояний носителя заряда с вихрем (вортексона) и двух носителей с вихрем (бивортексона). Обсуждается возможная роль бивортексонов в проблеме высокотемпературной сверхпроводимости.

Виходячи з припущення про існування в купратних шарах високотемпературних надпровідників топологічних солітонів (вихорів) зроблено розрахунок енергій зв'язаних станів носія з вихорем (вортексона) та двох носіїв з вихорем (бівортексона). Обговорюється можлива роль бівортексонів в проблемі високотемпературної надпровідності.

Большое число экспериментов свидетельствуют о том, что высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) по своим характеристикам напоминают вырожденный бозе-газ, критическая температура T_c которого совпадает с температурой его вырождения [1–6]. Идея о существовании сверхтекучих «электронных молекул» в связи с проблемой сверхпроводимости (СП) была впервые высказана Оггом [7] и позже последовательно обсуждалась Шафротом [8] и другими [9], но продолжительное время из-за успехов теории БКШ в описании реальных сверхпроводящих металлов считалась имеющей только академический интерес.

Возобновление интереса к этой идее было вызвано, по-видимому, синтезом керамических висмутовых оксидов, в которых смешанная валентность Bi может стабилизироваться вследствие образования в них биполяронов [10] и тем самым осуществления спаривания не в импульсном (подобно сценарию БКШ с сильно перекрывающимися в реальном пространстве волновыми функциями куперовских пар), а в координатном пространстве (с отдельными, так называемыми локальными, парами). Теория СП локальных пар применительно к ВТСП, наиболее развитая для случая биполяронов малого радиуса [11], основана на упомянутых выше экспериментальных наблюдениях с учетом магнитной составляющей волновых функций [12,13]. Другими словами, (би)поляроны в ВТСП должны быть «смешанными», т.е. включать такую автолокализацию носителя, которая обеспечивается деформированием как кристаллической (решетки), так и магнитной (спиновой структуры) подсистем.

Следует заметить, что ВТСП системы с резко выраженным квази-2D характером электронных и магнитных свойств и относительно малой плотностью свободных носителей действительно имеют хорошие условия для формирования в них именно локальных пар, поскольку любое (сколь угодно малое, но конечное) притяжение обеспечивает в 2D системах существование двухчастичного связанного состояния. В последнее время для таких ферми-систем с притяжением между носителями удалось построить теорию СП, охватывающую оба предельных случая (куперовское и локальное спаривания)* [14–16]. В ней локальные пары существуют независимо от источника вызвавшего их по-

* Однако необходимо иметь в виду, что разделение пар на два типа, строго говоря, условно и отражает лишь соотношение между длиной когерентности и размером собственно пары. К тому же, обе последние характеристики существенно зависят от температуры [17] и вида электронного спектра [18], так что доказательства проявления того или иного типа пары следует приводить с известной осторожностью, понимая, что кроссовер от локального к куперовскому типу спаривания может осуществляться при изменении не только концентрации носителей, но и температуры при постоянной концентрации, что, несомненно, более интересно.

© В. М. Локтев, В. А. Стефанович, 1995

явление взаимодействия, если плотность затравочных фермионов невелика (точнее, энергия Ферми системы меньше энергии упомянутого связанного состояния). Поэтому нам представляется важнее знать, чем вызвано притяжение между фермионами, а не какие по размеру пары образуются в ВТСП соединениях.

В настоящей работе предлагается один из возможных механизмов притяжения, связанный, во-первых, с $2D$ характером электронных и, главным образом, магнитных параметров ВТСП медных оксидов и, во-вторых, с существованием в последних магнитных вихрей (МВ) или топологических солитонов. Будет показано, что носители (дырки в ВТСП) при некоторых условиях связываются с такими солитонами, образуя устойчивые заряженные вихри — *вортексоны* [19], которые вследствие особенностей их динамики притягиваются друг к другу, если топологические заряды МВ противоположны. Будут рассчитаны энергии связи вортексонов и *бивортексонов* малого радиуса и обсуждена их возможная роль в проблеме ВТСП.

Структура и энергия вортексона

Зададим энергию системы МВ + дырка в простейшем виде

$$E_v = -\,d\int \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})T_{\mathrm{kin}}\hat{\psi}(\mathbf{r})\,d^2\mathbf{r} +$$

$$+\,J_{v-h}J_1 d\int \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\vec{\sigma}\hat{\psi}(\mathbf{r})\mathbf{m}(\mathbf{r})\,d^2\mathbf{r} + E_{AFM}\{\mathbf{m},\mathbf{l}\}\,, \qquad (1)$$

где d — величина порядка расстояния между купратными слоями, добавленная для сохранения размерности. Первое слагаемое в (1) определяет кинетическую энергию частицы, второе описывает взаимодействие* магнитного поля частицы $J_{v-h}\hat{\psi}^{+}\vec{\sigma}\hat{\psi}$ ($\vec{\sigma}_j$ ($j = x, y, z$) — матрицы Паули, J_{v-h} — безразмерная обменная константа МВ — дырка) с единичным вектором намагниченности $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_0$ (M_0 — намагниченность насыщения) антиферромагнитно (АФМ) упорядоченного купратного слоя; $J_1 \equiv g_h\mu_B M_0$, $g_h = 2$ — g-фактор носителя, μ_B — магнетон Бора; наконец, третье слагаемое определяет энергию АФМ без избыточного носителя заряда как функционал единичных ферро- $\mathbf{m}$ и антиферромагнитного $\mathbf{l}$ векторов

$$E_{AFM}\{\mathbf{m},\mathbf{l}\} =$$

$$= M_0^2 d\int\left[\frac{\alpha}{2}(\vec{\nabla}\mathbf{l})^2 + W_{an}(\mathbf{l}) + \frac{\delta}{2}\mathbf{m}^2\right]d^2\mathbf{r}\,. \qquad (2)$$

Здесь первые два слагаемые соответствуют энергии неоднородного обмена (α — его величина) и магнитной анизотропии; третье задает энергию однородного обмена с безразмерной константой $\delta = J/\mu_B M_0$ (J — обменная константа АФМ взаимодействия между спинами ближайших ионов меди). Минимизация (2) определяет структуру МВ (см., например, [20]), причем выбор вида энергии анизотропии (в том числе ее отсутствие, т.е. $W_{\mathrm{an}}(\mathbf{l}) = 0$) приводит к различным типам МВ [21].

Волновая функция $\hat{\psi}$, входящая в (1), является спинором $\hat{\psi}^{+} = \left(\psi_{\uparrow}^{*}, \psi_{\downarrow}\right)$, компоненты которого удовлетворяют условию

$$|\psi_{\uparrow}|^2 = |\psi_{\downarrow}|^2\,; \qquad (3)$$

при этом**

$$\psi_{\uparrow} = \psi_{\downarrow}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi\, e^{i\varphi_h}\,, \qquad (4)$$

$$\psi \equiv \psi(\mathbf{r})\,; \quad \varphi_h \equiv \varphi_h(\mathbf{r})\,.$$

Условие (3) является существенным для выбора вида взаимодействия в (1) и отражает тот хорошо установленный факт [22,23], что носители в ВТСП с дырочной проводимостью имеют в основном кислородное происхождение, т.е. движутся по анионам кислорода. Последние расположены в плоскостях CuO_2 строго симметрично между ближайшими ионами меди, или, иначе, магнитными подрешетками. Следствием этого для спина дырки является отсутствие обменного поля на ней со стороны ближайших соседей; поэтому он может равновероятно пребывать в состояниях с проекциями $\uparrow, \downarrow \equiv \pm 1/2$ (фрустрирующая, или ортогональная, дырка из-за перпендикулярности ее спина локальному направлению АФМ вектора, в чем легко убедиться).

Конкретизируем оператор кинетической энергии и запишем его в виде

$$T_{\mathrm{kin}} = \frac{\hbar^2}{2}\left[m_1^{-1}\left(k_x + k_y\right)^2 - m_2^{-1}\left(k_x - k_y\right)^2\right]; \qquad (5)$$

* Хотя локальная симметрия кислородной дырки D_{2h}, для простоты выбираем взаимодействие изотропным, так как это не отражается на результатах.

** Операция сопряжения в (4), строго говоря, несущественна и использовалась в конкретных расчетах как одно из следствий вышепринятого равенства (3).

$$\mathbf{k} \equiv -i\vec{\nabla},$$

который прямо учитывает достаточно важное обстоятельство, что поверхность Ферми в ВТСП проходит вблизи сравнительно плоского участка или седловой точки валентной зоны с эффективными массами m_j ($j = 1, 2$) [24,25]. Непосредственное вычисление кинетической энергии носителя может быть сделано подстановкой (П.3) (см. Приложение) в (5); оно дает

$$E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2 d}{2\mu} \int \left[(\vec{\nabla}\psi)^2 + \psi^2 (\vec{\nabla}\varphi_h)^2 \right] d^2\mathbf{r}\,; \qquad (6)$$

$$\mu^{-1} \equiv m_1^{-1} - m_2^{-1}\,.$$

Для расчета второго слагаемого полной энергии (1) воспользуемся хорошо известным фактом (см. [20]), что уравнения Ландау — Лифшица, получающиеся в результате минимизации функционала энергии (2) по векторам $\mathbf{m}$ и $\mathbf{l}$ в приближении $|\mathbf{m}| \ll |\mathbf{l}|$, могут быть сведены к единственному уравнению для АФМ вектора, причем имеет место соотношение Барьяхтара (мл.) — Иванова

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2\delta} \left[\mathbf{h} - (\mathbf{hl})\mathbf{l} \right]. \qquad (7)$$

В отличие от случая диэлектрического состояния стандартного АФМ, для которого $\mathbf{h}$ — внешнее магнитное поле, здесь (при учете «поля» носителей) $\mathbf{h} = J_{v-h} d\, \hat{\psi}^+ \vec{\sigma} \hat{\psi}$. В итоге, для второго слагаемого в (1) имеем

$$E_{v-h} = 2\pi J_0 d^4 \int_0^\infty \psi^4(\mathbf{r}) \cos^2\theta_{\mathbf{l}}(\mathbf{r})\, r\, dr\,; \qquad (8)$$

$$J_0 \equiv \frac{1}{\delta} J_1 J_{v-h}^2\,,$$

где использовано соотношение (7) и введены полярные координаты r и φ, согласно выбору координатных осей, показанному на рис. 1; при этом J_{v-h} ($\gtrsim \delta$) определено выше как безразмерное обменное взаимодействие МВ — носитель, а $\theta_{\mathbf{l}}$ и $\varphi_{\mathbf{l}}$ — угловые переменные вектора $\mathbf{l}$:

$$l_x + i l_y = \sin\theta_{\mathbf{l}} \exp(i\varphi_{\mathbf{l}})\,,$$

т.е. угол $\theta_{\mathbf{l}}$ отсчитывается от оси, лежащей в плоскости АФМ (в ней же лежит вектор $\mathbf{l}$ в однородном основном состоянии). Записывая (8), мы приняли во внимание то обстоятельство, что для спинора (3), как и должно быть, $h_z = 0$.

Полная система уравнений для определения равновесных значений $\mathbf{l}$ и $\hat{\psi}$ получается варьированием (1) по $\mathbf{l}$ и $\hat{\psi}$ с учетом (2) и (7) при дополнительном условии нормировки

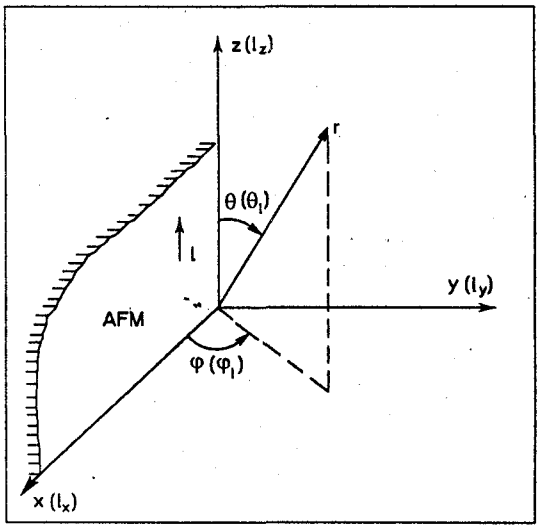

Рис. 1. Ориентация вектора антиферромагнетизма.

$$\int \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\, \hat{\psi}(\mathbf{r})\, d^2\mathbf{r} = d^{-1}\,. \qquad (9)$$

Полученная таким образом существенно нелинейная система уравнений оказалась достаточно сложной (см. Приложение), и нам не удалось найти ее аналитическое решение. Поэтому определение структуры и расчет энергии вортексона будем проводить с помощью прямого вариационного метода.

Принимая во внимание то, что свободные (кислородные) носители в купратном слое ВТСП находятся в p-состоянии, пробную функцию для них зададим в виде

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{15\pi d}\right)^{1/2} \frac{r}{r_0^2} \left(1 + \frac{r}{r_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \qquad (10)$$

$$\varphi_h = \frac{\nu}{2}\varphi\,,$$

где r_0 — вариационный параметр, определяющий радиус локализации носителя; $\nu = \pm 1, \pm 2, \ldots$ — топологический заряд (инвариант отображения плоскости r, φ АФМ на сферу $\mathbf{l}^2 = 1$). О возможности выбора угла φ_h в виде (10), т.е. связи того же угла с $\varphi_{\mathbf{l}}$, приводящей к полуцелому топологическому заряду носителя, см. Приложение.

Можно показать, что среди всех однопараметрических пробных функций функция вида (10) дает наименьшую энергию. Эта функция получается как волновая функция «двумерного» p-состояния из «трехмерной» пробной функции Пекара, ис-

пользованной при расчете свойств решеточных поляронов (см., например, [26]). Отметим важное обстоятельство: из-за наличия множителя ψ^4 в подынтегральном выражении (8) формирование искомого связанного состояния сопровождается также и поляронным эффектом*.

Пробную функцию для МВ ищем в виде [20]

$$\theta_l(\mathrm{r}) = \theta_l(r)\,; \quad \varphi_l = \nu\varphi\ . \tag{11}$$

Явный вид $\theta_l(r)$ зависит от выражения для энергии $W_{\mathrm{an}}(\theta_l, \varphi_l)$ в (2) и определяет тип МВ (локализованный или делокализованный, большого или малого радиуса [20,21]), с которым взаимодействует носитель (дырка). Для локализованного МВ граничные условия имеют вид $\theta_l(0) = \pi$; $\theta_l(\infty) = 0$. Выберем $\theta_l(r)$ в простейшем виде солитона Белавина—Полякова (СБП) [20]:

$$\mathrm{tg}\,\frac{\theta_l}{2} = (R/r)^{|\nu|}\ , \tag{12}$$

где $R << R_0 \equiv \sqrt{\alpha/\beta}$ — радиус локализации солитона; β — константа анизотропии АФМ (например, одноосной). Подобный выбор функции $\theta_l(r)$ обусловлен тем, что, во-первых, СБП существует и устойчив в АФМ уже в обменном приближении (т.е. при $W_{\mathrm{an}}(\mathrm{l}) = 0$) и, во-вторых, как будет показано ниже, наибольшая энергия ($\gtrsim 10^2$ K) диссоциации вортексона (и бивортексона) реализуется при взаимодействии дырки именно с СБП. В связи с этим, по-видимому, только вортексоны и бивортексоны, возникшие как связанные состояния носителей с СБП, могут представлять интерес для СП (и ВТСП) слоистых металлооксидов.

Пробная функция для делокализованного МВ имеет тот же вид (11), но с другими граничными условиями: $\theta_l(0) = \pi(1 - p)/2$, $\theta_l(\infty) = \pi/2$, где $p = \pm 1$ — второй топологический заряд (поляризация) солитона [27]. Точный вид решения для МВ, отвечающий этим граничным условиям, пока не получен; известно лишь, что энергия такого вихря для $p = \pm 1$ [21]

$$E_{AFM} \approx \frac{1}{2}\pi\, a\alpha\, \nu^2 M_0 \ln\left(S_v\,/R_0^2\right) \tag{13}$$

(a — постоянная АФМ решетки, S_v — площадь, охватываемая МВ). Таким образом, в отличие от случая СБП, энергия магнитной анизотропии (см. определение R_0) важна для описания структуры такого МВ.

Перейдем к конкретным расчетам. Подстановка (10)–(12) в (2), (6) и (8) дает следующее выражение для безразмерной энергии $W^{(1)}$ связанного состояния СБП — дырка:

$$W^{(1)} \equiv 10\,\frac{E_v - E_{AFM}}{J_0}\left(\frac{R}{d}\right)^2 = \frac{1}{\lambda^2}\left(\frac{32}{45\pi}\,I_1 - \kappa u\right), \tag{14}$$

где введены обозначения

$$I_1 \equiv \int_0^\infty t^5(1 + t^4)\exp(-4t) f(\lambda t)\, dt\,;$$

$$\lambda \equiv r_0/R\,; \quad u \equiv 1 + (3/8)\,\nu^2\,; \quad \kappa \equiv \hbar^2/(J_0|\mu|d^2)\,;$$

$$f(\xi) \equiv \left(\xi^{2|\nu|} - 1\right)^2\left(\xi^{2|\nu|} + 1\right)^{-2}.$$

При выводе (14) мы учли, что вортексон, как будет видно, существует лишь при $\mu < 0$ (или $J_0 < 0$, если $\mu > 0$), что, вообще говоря, не противоречит дырочному характеру проводимости и положению уровня Ферми в валентной зоне, имеющим место в ВТСП**. Можно также показать, что минимизация по R не изменяет энергию связи носителя с МВ, поэтому единственным вариационным параметром в (12) является радиус r_0.

Уравнение $dW^{(1)}/d\lambda = 0$ может быть переписано в виде

$$\kappa = \frac{128}{45\pi u}\left(I_1 - \frac{1}{2}\,I_2\right); \tag{15}$$

$$I_2 \equiv \int_0^\infty t^7(1 + t)^3 \exp(-4t) f(\lambda t)\, dt\,.$$

Зависимость $\lambda(\kappa)$, построенная по формуле (15), показана на рис. 2,*а* для разных значений топологического заряда ν. Эту зависимость можно трактовать как «фазовую диаграмму» вортексонов. Видно, что они существуют в сравнительно узком

* Подчеркнем, что в, принципе, МВ мог бы служить для дырки потенциальной ямой, если бы она непосредственно взаимодействовала с АФМ вектором магнитной подсистемы. Ортогональный же носитель «ощущает» (см. (1)) лишь флуктуации ФМ вектора, последней, которые вследствие (7) сами определяются присутствием носителя. Это самосогласование и названо поляронным эффектом.

** В этом смысле вортексон (это же относится и к бивортексону) является зарядово-несимметричным объектом.

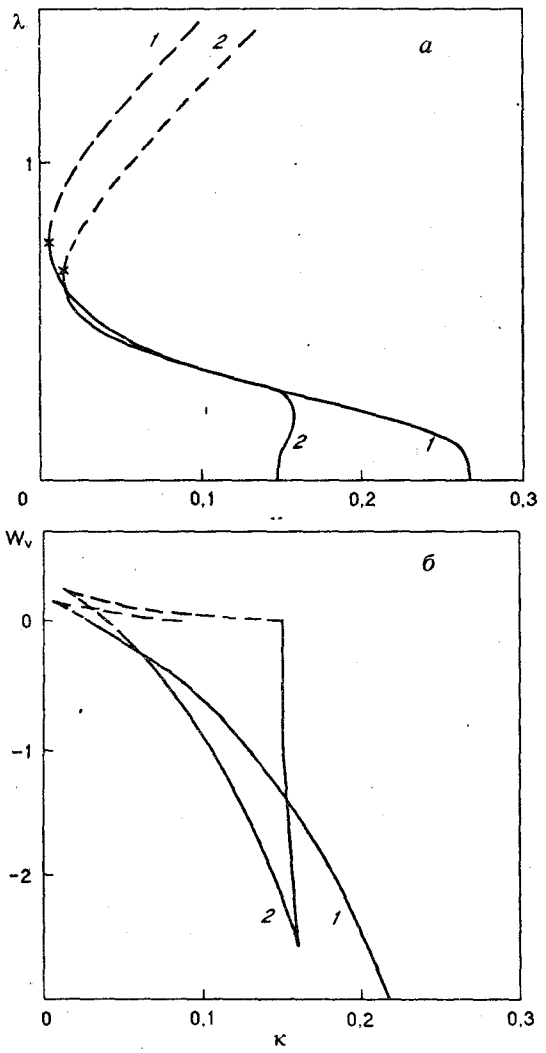

Рис. 2. Зависимости $\lambda(\kappa)$ (*а*) и $W_v(\kappa)$ (*б*). Цифры около кривых отвечают значениям $|\nu|$. Сплошная кривая — устойчивые вортексоны, пунктир — неустойчивые. Крестики на кривых рис. 2,*а* определяют значения κ, при которых высота барьера на рис. 2,*б* максимальна.

интервале значений κ. Энергия вортексона W_v после минимизации (14) по λ как функция того же параметра κ показана на рис. 2,*б*. Из него следует, что в достаточно широком диапазоне значений κ энергия вортексона ниже энергии свободного МВ. Кроме того, на рис. 2,*б* показано, что энергия вортексона отделена от энергии свободного (незаряженного) МВ барьером («клюв» на зависимости $W_v(\kappa)$), так как существуют критические значения κ_{cr} (определяемые условием $W_v(\kappa_{cr}) = 0$) и $\lambda_{cr} \equiv \lambda(\kappa_{cr})$. При этом устойчивыми являются лишь вортексоны с $\lambda < \lambda_{cr}$. Последнее неравенство означает, что вортексоны имеют относительной малый радиус локализации (численные оценки будут сделаны ниже).

Отметим, что упомянутый барьер характерен для $3D$, однако отсутствует для $2D$ магнитных поляронов (см., например, [28]). Это, в свою очередь, свидетельствует о том, что для формирования вортексонного состояния одинаково существенны как отмеченный выше поляронный (автолокализационный), так и вихревой (выступающий как внешний потенциал) вклады.

Заметим также, что $W_v(\lambda = 0) = 0$ при $|\nu| > 1$, в то время как $W_v(\lambda = 0) \equiv W_v^{(\min)} \approx -7{,}794$ при $|\nu| = 1$. Значение $W_v^{(\min)}$ является наименьшим из всех W_v, и это означает, что при $|\nu| = 1$ вортексон в принципе может коллапсировать. Однако, поскольку параметр κ не может принимать произвольные значения, а является фиксированным при всех разрешенных κ, кроме единственного значения $\kappa \approx 0{,}268$, коллапса нет. Можно показать, что при малых λ величина $W_v \sim \lambda^{2|\nu|-2}$, так что при $\nu > 1$ вортексон не коллапсирует ни при каких значениях κ.

Рассмотрим теперь случай связи носителя с делокализованным МВ. Пробную функцию такого вихря выберем в виде

$$\theta_1(r) = \frac{\pi}{2}\frac{\xi^{2|\nu|}}{\xi^{2|\nu|}+1}; \quad \xi \equiv r/R_0 , \qquad (16)$$

который отвечает (см. выше) граничным условиям для делокализованного вихря с $p = 1$. Поскольку E_{AFM} не зависит от поляризации МВ, а его взаимодействие с носителем определяется $\sin\theta_1$, можно заключить (см. также [21]), что знак p не существен. Отметим, что радиус локализации такого МВ R_0 значительно больше радиуса локализации СБП R. Как будет видно ниже, именно это обстоятельство приводит к тому, что энергия диссоциации связанного состояния носителя и МВ этого типа оказывается ≈ 7 К, что делает их практически неактуальными для проблемы ВТСП*.

Подстановка (16) в (6) и (8) с учетом (11) и (10) в результате дает (ср. с (14))

$$W^{(1)} \equiv 10\frac{E_v - E_{AFM}}{J_0}\left(\frac{R_0}{R}\right)^2 = \frac{1}{\lambda_0^2}\left(\frac{16}{45\pi}K_1 - \kappa u\right), \qquad (17)$$

* Другими словами, «размер» МВ более других характеристик последнего (например, типа и величины слабой магнитной анизотропии) сказывается на значении связи носитель — МВ.

где

$$K_1 \equiv \int_0^\infty t^5(1+t)^4 \exp(-4t)\cos^2\theta_1(\lambda_0 t)\,dt;$$

$$\lambda_0 \equiv r_0/R_0\ ,$$

причем $\theta_1(\xi)$ определено в (16). Зависимость $\kappa(\lambda_0)$ также находится из условия $dW^{(1)}/d\lambda_0 = 0$ и имеет вид (ср. с (15))

$$\kappa = \frac{16}{45\pi u}\left(K_1 + \frac{\lambda_0}{2}K_2\right)\ ; \qquad (18)$$

$$K_2 \equiv \int_0^\infty t^6(1+t)^4 \exp(-4t) f_1(\lambda_0 t)\,dt;$$

$$f_1(\xi) \equiv \pi\,|\nu|\,\frac{\xi^{2|\nu|-1}}{\xi^{2|\nu|}+1}\sin\pi\frac{\xi^{2|\nu|}}{\xi^{2|\nu|}+1}.$$

Поведение кривых $\lambda_0(\kappa)$ и энергии $W_{dv}(\kappa)$ делокализованного вортексона с $|\nu| = 1$ показаны на рис. 3. Несмотря на некоторое сходство с рассмотренным выше случаем фермиона, локализованного на СБП, имеются и существенные различия. Прежде всего отсутствует возможность коллапса такого заряженного МВ, что связано с тем, что здесь для малых λ_0 энергия $W_{dv} \sim \lambda^{4|\nu|-2}$, т.е. даже при $|\nu| = 1$ значение $W_{dv}(\lambda_0 = 0) = 0$. Кроме того, отсутствует барьер, отделяющий вортексон от свободного МВ. Это свидетельствует о том, что основной вклад в энергию связи вортексона в этом случае вносит только поляронный эффект (а не совместно с вихревым вкладом, как это имеет место для СБП). По этой причине минимальная энергия делокализованного вортексона $W_{dv}^{(\min)} \approx \approx -0{,}53$, что по абсолютной величине намного меньше, чем для заряженного СБП. Именно последнее обстоятельство обусловливает столь малую энергию носителя с делокализованным вихрем.

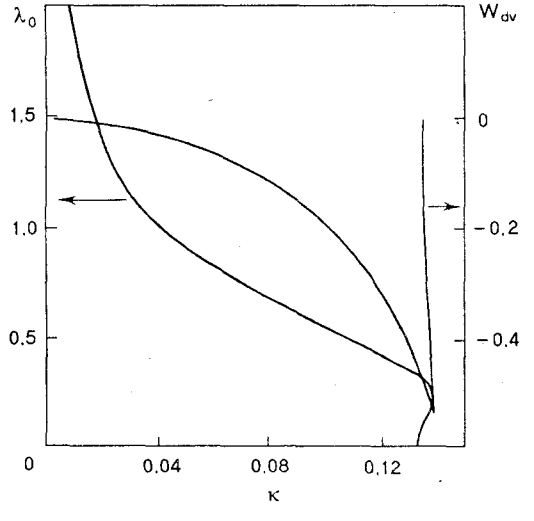

Рис. 3. Зависимости $\lambda_0(\kappa)$ и $W_{dv}(\kappa)$ для связанного состояния дырки с делокализованным МВ. Кривые построены для $|\nu| = 1$.

Бивортексон малого радиуса

В данном разделе остановимся на расчете энергии связи синглетного бивортексона — связанного состояния двух носителей с противоположными проекциями спинов и двух МВ с противоположными топологическими зарядами — вихревых «молекул» (по терминологии [29]). Насколько нам известно, вопрос о структуре подобной вихревой молекулы к настоящему времени не получил окончательного ответа. Исследование возможной структуры бивортексона может проводиться в рамках двух подходов. Один состоит в том, что «вихревая часть» бивортексона представляется одним МВ, т.е. связанным состоянием двух делокализованных вихрей с противоположными поляризациями p. В литературе (см. [21]), высказывалось мнение, что таким связанным состоянием является, в частности, СБП. Этот подход, в котором бивортексон формируется на базе двух делокализованных МВ (т.е. одного СБП), назовем «гелиевым», ибо электронная (дырочная) конфигурация двукратно заряженного вихря в данном случае подобна атому гелия (рис. 4,*а*), где роль ядра играет собственно СБП.

В другом подходе, который мы назовем «водородным», «вихревая часть» бивортексона состоит из двух отдельных делокализованных МВ, или СБП (рис. 4,*б*), различающихся знаками топологического заряда ν. Здесь конфигурация напоми-

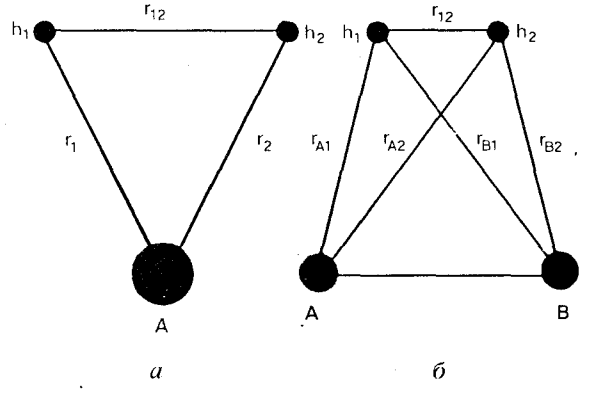

Рис. 4. Структура бивортексона в «гелиевом» (*а*) и «водородном» (*б*) подходах (A, B — МВ, h_j — дырки).

нает молекулу водорода, а ядрам соответствует каждый из МВ.

Численные оценки показали, что энергии связи бивортексонов в обеих структурах имеют один порядок величины. Однако вычислительные трудности во втором подходе оказываются намного бóльшими, поэтому в данной работе количественное исследование структуры и энергии связи бивортексона будет ограничено первым («гелиевым») подходом.

При этом подходе простейшее выражение для энергии бивортексона может быть записано в виде

$$E_{bv} = -d^2 \int \hat{\Psi}^+ \sum_{j=1,2} T_{\text{kin}}^{(j)} \hat{\Psi} d^2\mathbf{r}_1\, d^2\mathbf{r}_2 +$$

$$+ \frac{e^2 d^2}{\varepsilon} \int \frac{\hat{\Psi}^+\hat{\Psi}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^2\mathbf{r}_1\, d^2\mathbf{r}_2 +$$

$$+ J_{v-h} J_1 d^2 \int \sum_{j=1,2} \mathbf{h}_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\mathbf{m}(\mathbf{r}_j) d^2\mathbf{r}_1\, d^2\mathbf{r}_2 \; ; \quad (19)$$

$$\mathbf{h}_j \equiv \hat{\Psi}^+ \vec{\sigma}_j \Psi \, ,$$

где ε — статическая диэлектрическая проницаемость. Как и ранее, первое слагаемое в (19) описывает кинетическую энергию носителей, в которой $T_{\text{kin}}^{(j)}$ определено в (5), второе — их кулоновское отталкивание в поляризующейся среде, третье — взаимодействие носителей с МВ. Нетрудно убедиться, что стандартный выбор волновой функции $\hat{\Psi}$ пáры в виде произведения координатной и спиновой частей (см., например, [30]) не отражает важного факта фрустрированности дырок в медно-кислородных плоскостях ВТСП. Правильная волновая функция для этого случая (причем как в «гелиевом», так и «водородном» подходах) имеет следующий вид:

$$\hat{\Psi} \equiv \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2}\left[\hat{\psi}_1(\mathbf{r}_1)\hat{\psi}_2(\mathbf{r}_2) + \hat{\psi}_1(\mathbf{r}_2)\hat{\psi}_2(\mathbf{r}_1)\right] , \quad (20)$$

где в «гелиевом» подходе

$$\hat{\psi}_1(\mathbf{r}_1) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \end{pmatrix} = \hat{\psi}_2(\mathbf{r}_1) \, ;$$

$$\hat{\psi}_2(\mathbf{r}_2) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_2) \\ \psi_1^*(\mathbf{r}_2) \end{pmatrix} = \hat{\psi}_1(\mathbf{r}_2) \, ; \quad (21)$$

$$\psi_1(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi(\mathbf{r}_j) \exp(i\varphi_{jh}) \, , \quad \varphi_{jh} \equiv \frac{\nu}{2}\varphi_j \, .$$

Выбор знака («+») в линейной комбинации (20), как известно, соответствует синглетному состоянию пáры с энергией, более низкой, чем при выборе противоположного знака, который определял бы триплетное состояние пары; такая ситуация аналогична классификации состояний по величине полного спина и для атома гелия [30].

Дальнейшее вычисление сводится к подстановке в (19) пробных функций (10)–(12) с учетом (5). Расчет кинетического слагаемого (при учете соотношений (21) дает выражение (ср. (6))

$$E_{\text{kin}}^{(bv)} = -\frac{\hbar^2 d^2}{|\mu|} \int \psi^2(\mathbf{r}_2)\, d^2\mathbf{r}_2 \int \left\{ \left[\vec{\nabla}\psi(\mathbf{r}_1)\right]^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{\nu^2}{4r_1^2}\psi^2(\mathbf{r}_1) \right\} d^2\mathbf{r}_1 \equiv -\frac{\hbar^2 u}{5|\mu| r_0^2} \, , \quad (22)$$

при выводе которого мы приняли во внимание равенство интегралов, получающихся друг из друга перестановкой $\mathbf{r}_1 \rightleftarrows \mathbf{r}_2$. Кулоновское слагаемое имеет вид

$$E_{\text{Coul}} = \frac{4e^2\Delta}{225\pi^2\varepsilon r_0} \, ,$$

$$\Delta = 2\pi \int_o^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^{2\pi} d\varphi \times$$

$$\times \frac{r_1^3 r_2^3 (1+r_1)^2 (1+r_2)^2 \exp\left[-2(r_1+r_2)\right]}{\left(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\varphi\right)^{1/2}} \approx 235 \, . \quad (23)$$

Заметим здесь, что, несмотря на $2D$ характер задачи, кулоновское взаимодействие выписано нами в $3D$ виде, так как, вообще говоря, оно имеет место не только в плоскостях CuO_2, но и во всем пространстве.

Наконец, нелинейный член, описывающий взаимодействие носителей с МВ, имеет вид

$$E_{\text{int}} = 64\pi^2 J_0 d^8 \times$$

$$\times \int_0^\infty \psi^4(\mathbf{r}_1) r_1\, dr_1 \int_0^\infty \psi^4(\mathbf{r}_2) \cos^2\theta_1(r_2) r_2\, dr_2 \, , \quad (24)$$

в котором J_0 задано формулой (8).

Комбинируя выражения (22)–(24), приходим к безразмерной энергии связанного состояния пары носителей на СБП:

$$W^{(2)} \equiv 5\frac{E_{bv} - E_{AFM}}{J_0}\left(\frac{R}{d}\right)^2 = \frac{\gamma}{\lambda} + \frac{\gamma_1}{\lambda^4} I_1 - \frac{\kappa u}{\lambda^2} \, ; \quad (25)$$

$$\gamma \equiv \frac{4e^2R\Delta}{45\pi^2 J_0 \varepsilon d^2}; \quad \gamma_1 \approx 0{,}01668\left(\frac{d}{R}\right)^2,$$

где величины λ, κ и I_1 определены выше. Зависимость $\lambda(\kappa)$, как и для случая вортексона, находится из условия экстремума $dW^{(2)}/d\lambda = 0$ и имеет вид

$$\kappa = \frac{2\gamma_1}{\mu\lambda^2}\left(I_1 - 2\,|\nu|\lambda^{2|\nu|}I_3\right) + \frac{\gamma\lambda}{2}; \qquad (26)$$

$$I_3 \equiv \int_0^\infty t^{5+2\nu}(1+t)^4 \exp(-4t)\frac{(\lambda t)^{2|\nu|}-1}{\left[(\lambda t)^{2|\nu|}+1\right]^3}\,dt.$$

Расчет функций $\lambda(\kappa)$ и энергии связи бивортексона $W_{bv}(\kappa)$ требует задания вычисленных значений параметров γ и γ_1 (25), что будет сделано в следующем разделе.

Обсуждение результатов

Для того чтобы определить области изменения найденных выше величин, используем типичные для металлооксидных ВТСП значения параметров: $d \approx 10$ Å, обменная константа $J \approx 0{,}14$ эВ, $J_{v-h} \approx 2\delta$ [31,32]; радиусы $R \approx 20$ Å и $R_0 \approx 100$ Å [9]. Считая $M_0 \approx \mu_B g_{Cu} S_{Cu}/a^3$, где $a \approx 4$ Å, $g_{Cu} \approx 2$ и $S_{Cu} \approx 1/2$, получаем, что $J_0 \approx 1{,}12$ эВ ($\approx 1{,}3\cdot 10^4$ K). Тогда величины, характеризующие вортексон на СБП, имеют следующие значения:

$$\kappa = \frac{0{,}068}{\eta}; \quad r_0 \approx 20\lambda\ [\text{Å}], \qquad (27)$$

$$E_v^D \equiv E_v - E_{AFM} \approx 1300\left(\frac{d}{R}\right)^2 |W_v|\ [\text{K}],$$

где E_v^D — энергия диссоциации такого вортексона: $\eta \equiv |\mu|/m_e$ — безразмерная эффективная масса носителя. Из условия (см. рис. 2,*a*, $|\nu| = 2$) $0{,}01 \le \kappa \le 0{,}016$ находим, что $0{,}4 \lesssim \eta \lesssim 7$, что достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными по эффективной массе дырок в ВТСП [13,31]. Полагая далее $W_v \approx -0{,}3$ (для $\nu = 1$, $\lambda \approx 0{,}4$ и $r_0 = 8$ Å), получаем оценку энергии диссоциации $E_v^D \approx 100$ K, что свидетельствует о стабильности вортексона, по крайней мере при достаточно низких температурах.

Энергия связи вортексона на базе делокализованного МВ дается следующим выражением:

$$E_{dv}^D = 1300\left(\frac{d}{R_0}\right)^2 |W_{dv}|\ [\text{K}], \quad r_0 = 10^2\lambda_0\ [\text{Å}], \qquad (28)$$

откуда при минимальном значении $W_{dv}^{(\min)} \approx -0{,}53$ имеет $E_{dv}^D \approx 7$ K. Столь малая энергия диссоциации такого вортексона делает связывание носителей с делокализованными МВ маловероятным. Этот же вывод касается и связи носителя с $2D$ локализованным солитоном большого радиуса; она также оказывается порядка 1 K из-за того, что размер такого солитона $\approx R_0$ [20].

Для бивортексона параметры κ и r_0 такие же, как и для вортексона на СБП; они прямо следуют из (27). Остальные параметры:

$$E_{bv}^D \approx 2600\left(\frac{d}{R}\right)^2 |W_{bv}|\ [\text{K}], \qquad (29)$$

$$\gamma \approx 5{,}442; \quad \gamma_1 \approx 4{,}17\cdot 10^{-3},$$

где E_{bv}^D — энергия диссоциации бивортексона в «гелиевом» подходе. Важно отметить, что при $\gamma_1 = 0$ зависимость энергии $W^{(2)}$ (25) от λ минимума не имеет, отсюда следует естественный вывод, что без взаимодействия МВ—носитель бивортексон не существует. Однако даже малое значение γ_1 в силу своей положительности и пропорциональности соответствующего слагаемого λ^{-4} приводит к формированию минимума на кривой $W^{(2)}(\lambda)$. Зависимости $\lambda(\kappa)$ и $W_{bv}(\kappa)$ для γ и γ_1 из (29) показаны на рис. 5 для $\varepsilon \approx 50$ и $|\nu| = 1$; случай $|\nu| > 1$ дает качественно близкие результаты. Из рис. 5 видно, что свойства бивортексона на основе СБП анало-

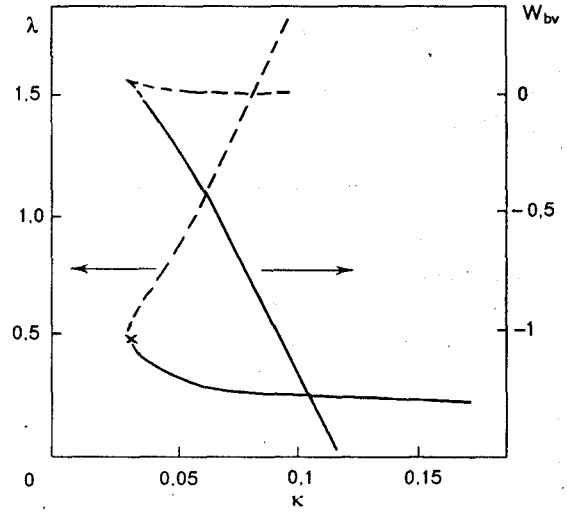

Рис. 5. Зависимости $\lambda(\kappa)$ и $W_{bv}(\kappa)$ для «гелиевого» бивортексона. Обозначения те же, что и на рис. 2.

гичны свойствам вортексона на том же МВ (см. рис. 2): бивортексонное состояние также отделено от свободного МВ барьером, при этом $\lambda_{cr} \approx 0{,}4$, $\kappa_{cr} \approx 0{,}035$. В отличие от случая вортексона значения κ здесь ограничены только снизу.

Величины радиуса локализации и энергии связи бивортексона можно оценить, вновь используя приведенные выше экспериментально наблюдаемые параметры металлооксидов. При $W_{bv} = -0{,}2$; $\lambda \approx 0{,}3$; $\kappa \approx 0{,}0475$ получаем $\eta \approx 1{,}5$, $r_0 = 6$ Å, $E_{bv}^D \approx 130$ K. В то же время точность определения, например, параметров J_{v-h} и R нельзя признать достаточно высокой [31,32]. Поэтому, возможно, более разумно поступить по-другому: задав $E_{bv}^D \approx 1000$ K и $r_0 \approx 10$ Å, определить соответствующие этим значениям величины J_{v-h} и R. Такая процедура приводит (при $W_{bv} \approx -1$, $\lambda \approx 0{,}25$, $\kappa \approx 0{,}1$) к $J_{v-h} \approx 4{,}8$, $R \approx 40$ Å, которые можно признать вполне разумными. С другой стороны, по некоторым данным (например, [31]), длина когерентности в ВТСП составляет около 15 Å. Полагая при этом по-прежнему $E_{bv}^D \approx 1000$ K, найдем, что $J_{v-h} \approx 7\,\delta$ при $R = 60$ Å.

Сделанные оценки позволяют заключить, что имеется достаточно широкая область параметров металлооксидных ВТСП, в которой существует устойчивое образование с зарядом $2e$ и локальным характером его формирования, причем энергия связи сопоставима с наблюдаемыми критическими температурами ВТСП. Можно надеяться, что бивортексоны как тип пар, специфичный именно для соединений ВТСП на основе меди, могут конденсироваться, образуя сверхтекучую бозе-жидкость. В данном сценарии ВТСП магнетизм и спаривание не только не конкурируют, но являются обязательными и неотъемлемыми составляющими процесса перехода к конденсатному состоянию, которое, таким образом, реализуется посредством локальных пар, в данном случае — бивортексонов. Однако непосредственное описание самой конденсации и характеристик СП конденсата требует использования более точной модели, учитывающей, в частности, многозонность и непараболичность электронного спектра ВТСП, более сложный характер взаимодействия МВ — дырка, роль флуктуаций дискретности среды и т.д.

Заключение

Продемонстрированная в работе принципиальная возможность формирования в ВТСП купратах новых самосогласованных заряженных возбуждений локального типа — вортексонов, а главное — бивортексонов — может, вообще говоря, изменить взгляд на проблему ВТСП в целом. Особая роль возбуждений вихревой природы связана с наличием в медьсодержащих ВТСП фрустрирующих дырок и дальнодействующих магнитных корреляций с квази-$2D$ характером последних. Несмотря на приближенный (вариационный) метод расчета, можно с достаточной долей уверенности утверждать, что предложенный «бивортексонный» (топологический) механизм спаривания соответствует малой длине когерентности в ВТСП, сильно развитому в них ближнему магнитному порядку и, наконец, достаточно высоким критическим температурам, которые, строго говоря, пока не удалось убедительно связать с каким-либо стандартным механизмом спаривания*.

Можно также указать, что наблюдение вортексонов (бивортексонов) как образований со спиновой структурой возможно осуществить в экспериментах по рассеянию нейтронов. Присутствие возбуждений подобного типа должно, например, давать вклад в интенсивность центрального пика в динамическом структурном факторе рассеяния поляризованных нейтронов. Ситуация здесь во многом аналогична вкладу в центральный пик от МВ в обычных $2D$ АФМ [34].

Необходимо, наконец, сказать, что в ряде работ (например, [35,36]) предлагается другой, отличный от рассмотренного выше магнитный механизм притяжения фрустрирующих носителей заряда в ВТСП соединениях. Согласно этому механизму, кислородная дырка вызывает вблизи себя скос (canting) основной коллинеарной АФМ структуры, образованной спинами меди (иными словами, речь идет об относительно обычном магнитном полароне). При этом индуцированная таким образом суммарная (разумеется, нетопологическая) деформация от пары дырок требует меньшей энергии и тем самым аналогично случаю поляронов в решетке, если они сближаются, создаются предпосылками для появления спадающего $\sim |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-2}$

* Уместно напомнить, что немедленно после открытия ВТСП топологический механизм притяжения носителей, опирающийся на особый (не неелевский) характер упорядочения $2D$ АФМ, но не связанный с МВ, был предложен Андерсоном [33]. В настоящее время этот механизм в значительной мере утратил свою «прикладную» актуальность, поскольку эксперименты (см., например, обзор [32] и цитированную в нем литературу) не обнаружили каких-либо свидетельств отличия наблюдаемого магнитного упорядочения плоскостей CuO_2 в диэлектрических фазах ВТСП систем от стандартной неелевской двухподрешеточной (в плоскости) структуры.

притяжения между ними. Однако с этим трудно согласиться, так как результаты исследования фрустрирующих примесных центров в коллинеарных АФМ матрицах [37] такую картину не подтверждают. Прежде всего, как уже говорилось, вблизи подобных центров не возникает єкос (в том числе неоднородный) магнитных подрешеток. А кроме того, косвенное (через линейные спиновые возбуждения матрицы — магноны) взаимодействие между соответствующими центрами на средних расстояниях имеет знакопеременный характер [22] и, строго говоря, не может служить источником притяжения, в конечном итоге приводящего к спариванию.

Мы признательны Ю. Б. Гайдидею, Э. А. Пашицкому и С. М. Рябченко за обсуждение работы, а также А. С. Ковалеву за конструктивную критику и ценные замечания.

Данная работа выполнена в соответствии с проектом «Взаимосвязь» Государственной программы «Высокотемпературная сверхпроводимость» Государственного комитета Украины по вопросам науки и технологий и при частичной финансовой поддержке Международного научного фонда (гранты № U68000 и K5O100).

Приложение

Выпишем дифференциальные уравнения, определяющие структуру вортексона и «гелиевого» бивортексона.

1. Энергия вортексона с учетом выражения (4) для волновой функции дырки и связи (7) между m и l в угловых переменных для l имеет вид

$$E_v = \int f_v(\mathrm{r})\, d^2\mathrm{r}\,; \qquad (\Pi.1)$$

$$f_v(\mathrm{r}) \equiv \frac{\hbar^2 d}{2\mu}\left[(\vec{\nabla}\psi)^2 + \psi^2(\vec{\nabla}\varphi_h)^2\right] + E_{AFM} +$$

$$+ J_0 d^4 \psi^4\left[1 - \sin^2\theta_l \cos^2\left(2\varphi_h - \varphi_l\right)\right];$$

$$E_{AFM} = M_0^2 d \times$$

$$\times\left\{\frac{\alpha}{2}\left[\left(\vec{\nabla}\theta_l\right)^2 + \left(\vec{\nabla}\varphi_l\right)^2 \sin^2\theta_l\right] + W_{\mathrm{an}}\left(\theta_l, \varphi_l\right)\right\}.$$

Варьируя (П.1) независимо по $\psi, \varphi_h, \theta_l$ и φ_l, получаем дифференциальные уравнения, описывающие структуру вортексона:

$$\begin{cases} \Delta\psi - \psi(\vec{\nabla}\varphi_h)^2 + \dfrac{4|\mu|J_0 d^3}{\hbar^2}\psi^3\left[1 - \sin^2\theta_l\cos^2\left(2\varphi_h - \varphi_l\right)\right] = 0\,; \\ \Delta\varphi_h + \dfrac{2|\mu|J_0 d^3}{\hbar^2}\psi^2\sin^2\theta_l \sin 2\left(2\varphi_h - \varphi_l\right) = 0\,; \\ \Delta\theta_l - \dfrac{1}{2}(\nabla\varphi_l)^2 \sin 2\theta_l - \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\partial W_{\mathrm{an}}}{\partial\theta_l} + \dfrac{J_0 d^3}{\alpha M_0^2}\psi^4 \sin 2\theta_l \cos^2\left(2\varphi_h - \varphi_l\right) = 0\,; \\ \Delta\varphi_l \sin^2\theta_l - \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\partial W_{\mathrm{an}}}{\partial\varphi_l} + \dfrac{J_0 d^3}{\alpha M_0^2}\psi^4 \sin^2\theta_l \sin 2\left(2\varphi_h - \varphi_l\right) = 0\,. \end{cases} \qquad (\Pi.2)$$

При выводе (П.2) мы использовали тот факт, что вортексон существует (см. выше) при условии $\mu < 0$.

Система (П.2) является общей и определяет более широкий класс решений, чем обсуждаемый в тексте. Нетрудно видеть, что если энергия магнитной анизотропии W_{an} не зависит от φ_l, то указанный (частный) класс решений системы (П.2) имеет вид

$$\varphi_l = 2\varphi_h\,; \quad \varphi_l = \nu\varphi\,; \quad \varphi_h = \frac{\nu}{2}\varphi\,; \qquad (\Pi.3)$$

$$\psi \equiv \psi(r)\,; \quad \theta_l \equiv \theta_l(r)\,.$$

То обстоятельство, что из $\varphi_l = \nu\varphi$ следует $\varphi_h = \nu\varphi/2$, отражает интересный факт: топологически особый солитон «навязывает» свою топологию носителю так, что последний обладает не целым, а полуцелым топологическим зарядом. Отметим, что случай наличия полуцелого топологического заряда у частицы со спином 1/2 недавно обсуждался с других позиций (возможность существования фаз с магнитным потоком в $2D$ модели Хаббарда), но применительно к проблеме ВТСП в работе [34].

Подстановка (П.3) в (П.2) существенно упрощает эту нелинейную систему уравнений:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\psi}{dr}-\frac{\nu^2}{4r^2}\psi+\frac{4|\mu|J_0d^3}{\hbar^2}\psi^3\cos^2\theta_1=0\,;$$

$$\frac{d^2\theta_1}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\theta_1}{dr}-\frac{\nu^2}{2r^2}\sin 2\theta_1-\frac{1}{\alpha}\frac{\partial W_{an}}{\partial\theta_1}+\frac{J_0d^3}{\alpha M_0^2}\psi^4\sin 2\theta_1=0\,. \qquad (П.4)$$

Решения (П.4) с соответствующими граничными условиями для функций $\theta_1(r)$ и $\psi(r)$ (см. текст) определяет структуру вортексонов различного типа. Поскольку нам не удалось аналитически решить даже (П.4), структура вортексонов (и их энергия) была рассчитана прямым вариационным методом.

2. Энергия «гелиевого» бивортексона записывается в виде

$$E_{bv}=\int f_{bv}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)d^2\mathbf{r}_1\,d^2\mathbf{r}_2\,; \qquad (П.5)$$

$$f_{bv}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)\equiv\frac{\hbar^2d^2}{2\mu}\left\{\psi_2^2\left[\left(\vec{\nabla}_1\psi_1\right)^2+\psi_1^2\left(\vec{\nabla}_1\varphi_{1h}\right)^2\right]+\psi_1^2\left[\left(\vec{\nabla}_2\psi_2\right)^2+\psi_2^2\left(\vec{\nabla}_2\varphi_{2h}\right)^2\right]\right\}+$$

$$+\frac{e^2d^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\psi_1^2\psi_2^2+8J_0d^8\psi_1^4\psi_2^4\left[2-\sin^2\theta_{1l}\cos^2\left(2\varphi_{1h}-\varphi_{1l}\right)-\sin^2\theta_{2l}\cos^2\left(2\varphi_{2h}-\varphi_{2l}\right)\right]+$$

$$+E_{AFM}^{(1)}+E_{AFM}^{(2)}\,,$$

где $\psi_j\equiv\psi(\mathbf{r}_j)$; $\varphi_{jl}\equiv\varphi_l(\mathbf{r}_j)$; $\theta_{jl}\equiv\theta_l(\mathbf{r}_j)$, $\varphi_{jh}\equiv\varphi_h(\mathbf{r}_j)$, $j=1,2$; $\vec{\nabla}_j$ означает градиент по $\mathbf{r}_j$; $E_{AFM}^{(j)}$ определяется из (П.1) подстановкой θ_{jl}, φ_{jl}. Независимое варьирование (П.5) по ψ_j, φ_{jh}, θ_{jl} и φ_{jl} дает систему восьми нелинейных уравнений, определяющих в общем случае структуру «гелиевого» бивортексона:

$$\psi_2^2\left[\Delta_1\psi_1-\psi_1\left(\vec{\nabla}_1\varphi_{1h}\right)^2\right]-\psi_1\left[\left(\vec{\nabla}_2\psi_2\right)^2+\psi_2^2\left(\vec{\nabla}_2\varphi_{2h}\right)^2\right]+\frac{2e^2|\mu|d^2}{\hbar^2\varepsilon}\frac{\psi_1\psi_2^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}+\frac{32|\mu|J_0d^6}{\hbar^2}\psi_1^3\psi_2^4Q=0\,;$$

$$\psi_1^2\left[\Delta_2\psi_2-\psi_2\left(\vec{\nabla}_2\varphi_{2h}\right)^2\right]-\psi_2\left[\left(\vec{\nabla}_1\psi_1\right)^2+\psi_1^2\left(\vec{\nabla}_1\varphi_{1h}\right)^2\right]+\frac{2e^2|\mu|d^2}{\hbar^2\varepsilon}\frac{\psi_2\psi_1^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}+\frac{32|\mu|J_0d^6}{\hbar^2}\psi_2^3\psi_1^4Q=0\,;$$

$$\Delta_j\varphi_{jh}+\frac{16|\mu|J_0d^6}{\hbar^2}\psi_1^2\psi_2^2\sin^2\theta_{jl}\sin 2\left(2\varphi_{jh}-\varphi_{jl}\right)=0\,; \qquad (П.6)$$

$$\Delta_j\theta_{jl}-\frac{1}{2}\left(\vec{\nabla}_j\varphi_{jl}\right)^2\sin 2\theta_{jl}-\frac{1}{\alpha}\frac{\partial W_{an}}{\partial\theta_{jl}}+\frac{8J_0d^7}{\alpha M_0^2}\psi_1^4\psi_2^4\sin 2\theta_{jl}\cos^2\left(2\varphi_{jh}-\varphi_{jl}\right)=0\,;$$

$$\Delta_j\varphi_{jl}\sin^2\theta_{jl}-\frac{1}{\alpha}\frac{\partial W_{an}}{\partial\varphi_{jl}}+\frac{8J_0d^7}{\alpha M_0^2}\psi_1^4\psi_2^4\sin^2\theta_{jl}\sin 2\left(2\varphi_{jh}-\varphi_{jl}\right)=0\,;$$

$$Q\equiv 2-\sum_{j=1,2}\sin^2\theta_{jl}\cos^2\left(2\varphi_{jh}-\varphi_{jl}\right).$$

Уравнения системы (П.6), в которых используется индекс j, являются, как легко понять, парой уравнений. Как и в случае вортексона, здесь также полагалось $\mu<0$.

Подстановка класса решений (П.3) в (П.6) (с учетом индекса j) дает следующую систему четырех уравнений, определяющих структуру бивортексона (ср. с (П.4)):

$$\psi_2^2\left(\frac{d^2\psi_1}{dr_1^2}+\frac{1}{r_1}\frac{d\psi_1}{dr_1}-\frac{\nu^2}{4r_1^2}\psi_1\right)-\psi_1\left[\left(\frac{d\psi_2}{dr_2}\right)^2+\frac{\nu^2}{4r_2^2}\psi_2^2\right]+\frac{2e^2|\mu|d^2}{\hbar^2\varepsilon}\frac{\psi_1\psi_2^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}+$$
$$+\frac{32J_0|\mu|d^6}{\hbar^2}\psi_1^3\psi_2^4\left(\cos^2\theta_{1l}+\cos^2\theta_{2l}\right)=0;$$

$$\psi_1^2\left(\frac{d^2\psi_2}{dr_2^2}+\frac{1}{r_2}\frac{d\psi_2}{dr_2}-\frac{\nu^2}{4r_2^2}\psi_2\right)-\psi_2\left[\left(\frac{d\psi_1}{dr_1}\right)^2+\frac{\nu^2}{4r_1^2}\psi_1^2\right]+\frac{2e^2|\mu|d^2}{\hbar^2\varepsilon}\frac{\psi_2\psi_1^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}+ \qquad (\text{П}.7)$$
$$+\frac{32J_0|\mu|d^6}{\hbar^2}\psi_2^3\psi_1^4\left(\cos^2\theta_{1l}+\cos^2\theta_{2l}\right)=0;$$

$$\frac{d^2\theta_{jl}}{dr_j^2}+\frac{1}{r_j}\frac{d\theta_{jl}}{dr_j}-\frac{\nu^2}{2r_j^2}\sin 2\theta_{jl}-\frac{1}{\alpha}\frac{\partial W_{an}}{\partial\theta_{jl}}+\frac{8J_0d^7}{\alpha M_0^2}\psi_1^4\psi_2^4\sin 2\theta_{jl}=0.$$

Структура бивортексона также определялась прямым вариационным методом. Несмотря на это, мы сочли уместным привести полный вид системы (П.4) и (П.7), описывающих вортексон и бивортексон в континуальном приближении, так как, на наш взгляд, эти уравнения могут представлять достаточно общий интерес и исследоваться с использованием не только вариационного, но и всех других доступных математических методов. Обобщение полученных уравнений на случай дискретной среды не составляет принципиальных сложностей.

1. D. van der Marel, H.-U. Halermeier, D. Neitmann, W. Konig, and A. Wittlin, *Physica* **C176**, 1 (1991).
2. Y. J. Uemura, L. P. Lee, C. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. W. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H.Yamochi, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2665 (1991).
3. J. W. Loram, *Physica* **C171**, 243 (1990).
4. A. S. Alexandrov and J. Ranninger, *Solid State Commun.* **81**, 403 (1992).
5. H. L. Dewing and E. Salje, *Phys. Supercond. Sci. Technol.* **5**, 10 (1992).
6. И. М. Зарицкий, *Дис... докт. физ.-мат. наук*, ИФП Украины, Киев (1992).
7. R. Ogg, *Phys. Rev.* **69**, 243 (1946).
8. M. R. Shafroth, *Phys. Rev.* **III**, 72 (1963).
9. Э. А. Пашицкий, В. Л. Винецкий, *Письма в ЖЭТФ* **46**, Приложение, 124 (1987).
10. А. М. Габович, Д. П. Моисеев, *УФН* **150**, 599 (1986).
11. А. С. Александров, А. Б. Кребс, *УФН* **162**, 1 (1992).
12. L. J. de Jongh, *Solid State Commun.* **65**, 963 (1988); *Physica* **C161**, 631 (1989).
13. N. Mott, *J. Phys.* **C5**, 3487 (1993).
14. M. Randeria, J.-M. Duan, and L.-Y. Shieh, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 981 (1989).
15. Э. В. Горбар, В. П. Гусынин, В. М. Локтев, *СФХТ* **6**, 453 (1993); *ФНТ* **19**, 171 (1993).
16. Э. В. Горбар, В. М. Локтев, В. С. Николаев, *СФХТ* **7**, 1 (1994).
17. В. П. Гусынин, В. М. Локтев, И. А. Шовковый, *Препринт ИТФ-94-23Р*, ИТФ НАН Украины, Киев (1994); *ЖЭТФ* **107**, №6 (1995).
18. Э. В. Горбар, В. М. Локтев, С. Г. Шарапов, *ФНТ* **21**, 421 (1995).
19. В. И. Локтев, В. А. Стефанович, *ФНТ* **21**, 459 (1995).
20. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
21. B. A. Ivanov, A. K. Kolezhuk, and D. D. Sheka, *Preprint ITP-93-61E*, ITP NASci, Kiev (1993).
22. М. А. Иванов, В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, *ЖЭТФ* **101**, 596 (1992).
23. В. М. Локтев, *ФНТ* **19**, 375 (1993).
24. D. M. Newns, P. C. Pattnaik, and C. C. Tsuei, *Phys. Rev.* **B43**, 3075 (1991).
25. E. Dagotto, A. Nazarenko, and M. Boninsegni, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 728 (1994).
26. С. И. Пекар, *Избранные труды*, Наукова думка, Киев (1983).
27. А. В. Никифоров, Э. Б. Сонин, *ЖЭТФ* **85**, 642 (1983).
28. Ю. Г. Семенов, В. А. Стефанович, *ЖЭТФ* **101**, 1024 (1992).
29. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1983).
30. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1973).
31. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
32. R. J. Birgeneau and G. Shirane, in: *Physical Properties of High-Temperature Superconductors*, I. D. M. Ginsberg (ed.), World Sci., Singapore (1983), p. 151.
33. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
34. G. Shirane, R. J. Birgeneau, Y. Endo, and M. A. Kastner, *Preprint Brookhaven Nat. Lab.* (1993); *Proceedings of LT-XX*, *Physica* B (1994), to be published.
35. A. Aharony, R. J. Birgeneau, A. Coniglio, M. A. Kastner, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988); *Physica* **C153–155**, 1211 (1988).
36. R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, and A. Aharony, *Z. Phys.* **B71**, 57 (1988).
37. M. A. Ivanov, V. M. Loktev, and Yu. G. Pogorelov, *Phys. Rep.* **153**, 209 (1987).
38. S. John and A. Golubentsev, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3343 (1993).

On the theory of interaction of delocalized charge carriers with magnetic excitations in high-T_c superconductors

V. M. Loktev and V. A. Stefanovich

Based on the assumption of the existence of magnetic topological solitons (vortices) in cuprate layers of high-T_c superconductors, the energies of carrier-vortex (vortexon) and two carriers-vortex (bivortexon) bound states are calculated. It is speculated that bivortexons may effect high-T_c superconductivity.