

УДК 538.945, 539.196.3

В.В.Грачев (5 курс, каф. ФППиНЭ), Е.В.Орленко, к.ф-м.н., доц.

ПРИМЕНЕНИЕ ОБМЕННОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ К ОПИСАНИЮ СПИНОВОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В ВТСП-МАТЕРИАЛАХ

ABSTRACT: We unify the method of exchange perturbation theory for multicenter systems. For the case of exchange degeneracy in the total spin of the system we give a secular equation. On the basis of this formalism we develop an algorithm for calculating the Heisenberg parameter for magnetic materials. Finally, we calculate the characteristics of antiferromagnetic transitions for the high- T_c materials $\text{La}_{2-x}\text{MeCuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$.

В работе предлагается аналитический метод расчета параметра Гейзенберга, фигурирующего в любой модели магнетизма ВТСП.

Квантово-химический анализ межатомного взаимодействия позволяет делать выводы о происхождении спонтанного упорядочения спинов и корректно вычислять входящий в теорию магнетизма сверхпроводников, как основной, параметр Гейзенберга. Упомянутый расчёт производится из первых принципов на основе разработанного вновь формализма Обменной Теории Возмущений (ОТВ) [1]. В алгоритме этого расчёта естественным образом учитывается влияние орбитального состояния связанных электронов на результирующее значение суммарного спина системы. В этом смысле, нет необходимости привлекать эффекты, связанные со снятием спин - орбитального взаимодействия.

Представляемый формализм позволяет справиться с основными проблемами, возникающими при построении ОТВ: неортогональностью базиса волновых функций многоцентральной системы, антисимметричных относительно межцентровых перестановок, и несимметричностью невозмущенного Гамильтониана и оператора возмущения относительно тех же перестановок [2]. Основой излагаемого метода является использование операторов возмущения и невозмущенного Гамильтониана в симметричном виде, что позволяет автоматически получать поправки к волновой функции правильно симметризованными.

Исходными данными для расчета являются: расстояния между ионами (в данном случае меди и кислорода); заряды ионов; орбитальные состояния электронов, принадлежащих данным ионам. Рассматриваются трехцентровые ($\text{Cu}^{2+} - \text{O}^{1-} - \text{Cu}^{2+}$ и $\text{O}^{1-} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{1-}$) фрагменты купратного слоя. Все возможные типы симметрии волновой функции системы электронов относительно межцентровых перестановок рассматриваются при помощи схем Юнга. Расчет поправок к энергии позволяет выявить наиболее выгодную конфигурацию спинов. При помощи этого метода были рассчитаны параметры магнитного упорядочения в $\text{La}_{2-x}\text{MeCuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$.

В цепочках купратного слоя анализ суперобменного взаимодействия позволяет не только вычислять а priori параметр Гейзенберга, но и даёт ясную картину тенденций к установлению наиболее выгодной энергетически конфигурации спинов. Не вдаваясь в подробности динамики процесса, удаётся предсказать статическую картину ориентирования спинов электронов, принадлежащих ионам меди и ионам кислорода. Численное значение указанного параметра прекрасно согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Орленко Е.В., Матисов Б.Г. Обменная теория возмущений. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 1998, 51 с.
2. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982, 310 с.