

ПОЛЯРОНЫ "ПОЧТИ БОЛЬШОГО РАДИУСА" И ОСОБЕННОСТИ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$

А. О. Гоголин¹⁾, А. С. Иоселевич

Экспериментальные данные по проводимости и эффекту Холла в La_2CuO_4 интерпретируются как свидетельство поляронности носителей. Объясняется анизотропия энергии активации проводимости. Развита теория поляронов почти большого радиуса.

Для понимания высокотемпературной сверхпроводимости в купратах¹ важно понять структуру носителей тока в этих веществах. В частности, интересно возникает ли поляронное одевание носителей, играющее принципиальную роль в некоторых теориях (см. например²). По-видимому, проще всего ответить на этот вопрос, исследуя несверхпроводящие кристаллы с малой концентрацией носителей, в которых можно пренебречь их взаимодействием друг с другом. В настоящей работе мы покажем, что необычная температурная зависимость проводимости диэлектрического $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ ³ может быть естественно объяснена в рамках поляронной модели.

Первые систематические исследования⁴ слабо легированного La_2CuO_4 обнаружили прыжковый характер проводимости, в широкой области температур хорошо описывавшейся законом Мотта:

$$\sigma_{\parallel, \perp}^{(M)}(T) \approx B_{\parallel, \perp}^{(M)} \exp\{- (T_0/T)^{1/4}\}. \quad (1)$$

Показатель степени 1/4 и совпадение величин T_0 ($\sim 10^6$ К) для проводимости вдоль слоев (σ_{\parallel}) и перпендикулярно им (σ_{\perp}) свидетельствуют о трехмерном характере прыжков. Относительно небольшая анизотропия предэкспоненты $B_{\parallel}^{(M)}/B_{\perp}^{(M)} \lesssim 10$ не зависит от T и отражает анизотропию эффективных радиусов локализованных состояний, связанную с анизотропией туннельных интегралов перескока t_{\parallel} и t_{\perp} . Ранее нами приводились аргументы^{5,6} в пользу того, что локализация носителей на примесях должна сопровождаться поляронным искажением. В частности, это позволяет объяснить эксперименты по магнитосопротивлению в прыжковой области^{7,8}.

Недавние эксперименты³ показали, что в чистых кристаллах при достаточно высоких температурах ($T > T^*$) закон Мотта (1) сменяется простой активационной зависимостью

$$\sigma_{\parallel, \perp}^{(A)}(T) \approx B_{\parallel, \perp}^{(A)} \exp(-E_{\parallel, \perp}/T). \quad (2)$$

Величина T^* уменьшается с уменьшением количества избыточного кислорода y , в типичных кристаллах с $y \sim 0,01$ величина $T^* \sim 50$ К. Анизотропия проводимости $\gamma = \sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp}$ возрастает при увеличении T от значений $\gamma \sim 10$ при $T \lesssim T^*$ до $\gamma \sim 500$ при $T \sim 200$ К. Самое удивительное – это наличие анизотропии энергии активации, причем такой, что большей проводимости отвечает и большая энергия активации: $E_{\parallel} > E_{\perp}$. Найденная в³ температурная зависимость коэффициента Холла (при $\mathbf{H} \perp \text{CuO}_2$ слоям) также является активационной с энергией активации E_H , близкой к E_{\parallel} . Величина холловской подвижности $\mu_{\parallel} \sim 1$ см/В · с. В работах^{3,9} такая низкая подвижность объясняется рассеянием носителей (с умеренной эффективной массой $m^* \sim 2m_e$) на спиновых флуктуациях, при этом считается, что соответствующее время релаксации $\tau \sim \hbar/J \sim 10^{-14}$ с, где $J \sim 10^3$ К – характерная энергия магнонов в системе. При таких величинах m^* и τ удастся объяснить также и частотную зависимость проводимости⁹. Од-

¹⁾ Физический институт им. П.Н.Лебедева Академии наук СССР.

нако, магныны со столь большими энергиями не могут участвовать в рассеянии и величина τ^{-1} , во всяком случае, не должна превышать \hbar/T . С другой стороны, в работах ^{10,11} близкие значения подвижности связывались с большой массой $m^* \sim 10^2 - 10^3 m_e$, обусловленной поляронным эффектом. На наш взгляд, анизотропию энергии активации ³ невозможно объяснить, считая, что активация происходит в зону свободных носителей или на край подвижности. Одномерные локализационные эффекты, связанные с беспорядком между плоскостями, могут приводить к анизотропии, но другого знака ($E_{\perp} > E_{\parallel}$), чем наблюдаемая на эксперименте. Обратим внимание на то, что разность $E_{\parallel} - E_{\perp}$, вычисленная по данным ³ практически не меняется от образца к образцу, т.е. не зависит от y (см. рисунок).

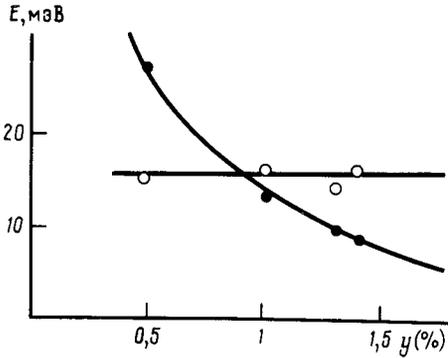


Рис. 1. Зависимость энергии активации от концентрации избыточного кислорода y (по данным работы ³), ● — E_{\perp} , ○ — $W_{\parallel} = E_{\parallel} - E_{\perp}$

Для объяснения транспортных свойств La_2CuO_4 (и, в частности, анизотропии энергии активации) мы предлагаем следующую картину. Большинство носителей локализовано на примесях, образуя связанные поляроны ^{5,6}. Уровень Ферми ϵ_F лежит в области локализованных состояний и при низких T доминирует прыжковая проводимость. При $T > T^*$ доминирует проводимость носителей, активированных в зону свободных поляронов; их число $N \propto \exp(-E_0/T)$. Энергия активации E_0 есть расстояние от ϵ_F до дна поляронной зоны. С повышением y система приближается к переходу диэлектрик–металл, ϵ_F поднимается и поэтому уменьшается E_0 . При переходах с узла на узел полярон должен преодолевать потенциальный барьер (см. ¹²). Вероятность преодоления барьера:

$$w \propto \exp(-S), \quad S \approx \begin{cases} cW/\omega & (T < T_c) \\ W/T & (T > T_c) \end{cases}, \quad (3)$$

где W — высота барьера, ω — частота колебаний вблизи минимума, $c = 4 \div 6$ некоторое число, зависящее от формы барьера ^{12,13}. Верхняя строка в (3) отвечает туннельному режиму преодоления барьера, нижняя — активационному. Температура переключения между режимами $T_c \approx \omega/c$. Мы предположим, что при переходах в CuO_2 -плоскости барьеры преодолеваются активационно, а при переходах с плоскости на плоскость — туннельно, т.е.

$$T_{c\parallel} < T < T_{c\perp}. \quad (4)$$

Тогда

$$\sigma_{\perp}^{(A)} \propto Nw_{\perp} \propto \exp(-E_0/T) \exp(-c_{\perp} W_{\perp}/\omega_{\perp}), \quad (5)$$

$$\sigma_{\parallel}^{(A)} \propto Nw_{\parallel} \propto \exp(-E_0/T) \exp(-W_{\parallel}/T). \quad (6)$$

Отождествляя E_0 с $E_{\perp}(y)$, а W_{\parallel} с $E_{\parallel} - E_{\perp} \approx 150$ К и относя второй множитель в (5) к $B_{\perp}^{(A)}$ мы получим формулу (2) с $E_{\parallel} - E_{\perp} > 0$ и зависящим только от структуры полярона, но не от качества кристалла. Анизотропия поляронного барьера обуславливает T -зависящую анизотропию проводимости: $\gamma \propto \exp(c_{\perp} W_{\perp}/\omega_{\perp} - W_{\parallel}/T)$.

Наиболее нетривиальным местом в изложенной выше схеме является требование неравенства (4) во всем интервале температур от T^* до ~ 200 К, возможного только при $T_{c\parallel} \ll T_{c\perp}$. Ниже мы покажем, что последнее неравенство естественно возникает в модели "полярона почти большого радиуса". Величина барьера W , входящая в (3), сильно зависит от радиуса полярона r . Для полярона малого радиуса $W \sim W_p$ — поляронного сдвига, типичные значения $W_p \sim \sim 0,5$ эВ¹². С увеличением r барьер понижается: $W \ll W_p$, в континуальном пределе $W = 0$. Малость $W_{\parallel} \approx 150$ К позволяет предположить, что в плоскости реализуется полярон "почти большого радиуса": $r_{\parallel} > a_0$, (a_0 — постоянная решетки), так что $W_{\parallel} \ll W_p$, но все же $W_{\parallel} > T$, ω_{\parallel} . Важно, что при увеличении r происходит также уменьшение величины ω в (3). Действительно в континуальном пределе группа пространственных трансляций становится непрерывной, и в системе возникают нулевые моды, отвечающие сдвигу полярона как целого. При больших, но конечных r трансляционным модам отвечают конечные, но малые частоты. С другой стороны, ясно, что именно эти сдвиговые моды ответственны за перенос полярона с узла на узел и в качестве ω в (3) будет фигурировать частота мягких сдвиговых мод. Для полярона малого радиуса $\omega \sim \omega_0$ — частоты фононов, формирующих полярон.

Итак, полярон в CuO_2 -плоскости имеет большой радиус, переходы вдоль плоскости адиабатичны, им отвечает малая высота барьера $W_{\parallel} \ll W_p$ и малая частота $\omega_{\parallel} \ll \omega_0$, барьер преодолевается активационно при $T > T_{c\parallel} \sim \omega_{\parallel}/c \ll \omega_0$. Как будет показано ниже, полярон почти большого радиуса можно представить как "жесткую" частицу, адиабатически переносящую свою шубу в слабо модулированном периодическом потенциале. При преодолении барьера такой полярон, в отличие от полярона малого радиуса, практически не "раздевается". В этой ситуации следует ожидать большого времени жизни τ и поэтому все поляроны с энергиями $E > W_{\parallel}$ будут давать обычный ($1/\text{нес}$, где $n \sim \exp(-E_{\parallel}/T)$) вклад в эффект Холла. Тогда холловская энергия активации $E_H \equiv E_{\parallel}$, в отличие от поляронов малого радиуса, для которых $E_H > E_{\parallel}$ (в простейшей модели $E_H = E_0 + 4/3W_{\parallel}$, см.¹²). Что касается переходов между разными плоскостями, то можно ожидать, что из-за малого t_{\perp} они не адиабатичны, поперечный радиус полярона мал, $W_{\perp} \sim W_p$, $\omega_{\perp} \sim \omega_0$ и $T_{c\perp} \gg T_{c\parallel}$.

Независимым тестом поляронного эффекта могло бы быть исследование термоэдс в CuO_2 -плоскости. Согласно стандартной теории (см.¹²) $S = E_s/eT + \text{const}$, причем, если различие E_{\parallel} и E_{\perp} действительно обусловлено поляронным эффектом, то E_s должно совпадать с $E_0 = E_{\perp}$, а не с E_{\parallel} .

Проиллюстрируем изложенные выше качественные выводы на простейшей модели частицы с квазиодномерным законом дисперсии, контактно взаимодействующей с одной ветвью бездисперсионных оптических фононов (набор одномерных цепочек Холстейна¹⁴, интеграл перескока электрона между которыми $t_{\perp} \ll t_{\parallel}$ — интеграла перескока вдоль цепочек). В адиабатическом приближении лагранжиан одной цепочки с электроном имеет вид:

$$L = (M/2) \sum_n \dot{Q}_n^2 - U\{Q\}, \quad (7)$$

$$U\{Q\} = (M\omega_0^2/2) \sum_n Q_n^2 + \min_{\psi} \sum_n \{t_{\parallel} |\psi_{n+1} - \psi_n|^2 - VQ_n |\psi_n|^2\},$$

где n — номер узла в цепочке, Q_n — ядерные смещения, U — адиабатический потенциал, ψ_n — нормированная волновая функция электрона. Если $\Lambda = 4tM\omega_0^2/V^2 \gg 1$, то радиус полярона $r_{\perp} = \Lambda a_0 \gg a_0$ и минимуму $U\{Q\}$ отвечает $Q_n = Q(x)|_{x=na_0}$, где $Q(x)$ — решение задачи в континуальном приближении. Введем коллективную координату x_0 (центр полярона), отвечающую сдвиговой моде. Ее энергия $U(x_0)$, отсчитанная от минимума U , равного $W_p = t/3\Lambda^2$, является периодической функцией x_0 с периодом a_0 , т.е. $U(x_0) = \sum_l U_l (1 - \cos 2\pi l x_0/a_0)$. Из-за гладкости $Q(x)$, коэффициенты U_l убывают, как $\exp(-\pi^2 \Lambda l)$ и для большого Λ можно ограничиться первой гармоникой. В результате из (8) получим эффективный лагранжиан для

коллективной координаты x_0 :

$$L_0 = M^* x_0^2 / 2 - W_{\parallel} \sin^2 (\pi x_0 / a_0), \quad (8)$$

где $M^* = M \int dx (dQ/dx)^2 a_0$ — масса континуального полярона. Она велика по адиабатическому параметру $(W_p / \omega_0)^2$ по сравнению с массой "голового" электрона $m \sim 1/t_{\parallel} a_0^2$. Высота барьера для поляронных прыжков вдоль цепочки экспоненциально мала $W_{\parallel} \propto W_p \exp(-\pi^2 \Lambda) \ll W_p$. Вероятность перехода для одномодовой системы (8) описывается формулой (3) с $W = W_{\parallel}$, $c = c_{\parallel} = 8$, и экспоненциально малой частотой сдвиговой моды $\omega = \omega_{\parallel} = \frac{\pi}{a_0} \sqrt{2W_{\parallel} / M^*} \propto \omega_0 \times \exp(-\pi^2 \Lambda / 2)$. Междоцепочечные переходы при малом t_{\perp} неадиабатичны и $r_{\perp} < a_0$: при этих переходах поляронная шуба должна полностью перестраиваться, поэтому соответствующий барьер $W_{\perp} \sim W_p$, а $T_{c\perp} \sim \omega_{\perp} \sim \omega_0$. Таким образом в рассмотренной модели $T_{c\parallel} / T_{c\perp} \propto \exp(-\pi^2 \Lambda / 2) \ll 1$ и существует широкая область температур (4) в которой движение полярона вдоль цепочек активационно, а перпендикулярно им — туннельно.

Квазиодномерная модель, допускающая точное решение в континуальном пределе, была рассмотрена выше для иллюстрации. Мы думаем, что аналогичными свойствами будут обладать и реальные квазидвумерные поляроны в La_2CuO_4 , структуру которых мы рассмотрим отдельно.

Мы благодарны Э.И.Рашба за полезное обсуждение.

Литература

1. *Bednorz J.G., Müller K.A.* Z. Phys. B, 1986, **64**, 189.
2. *Alexandrov A., Ranninger J.* Phys. Rev. B, 1981, **23**, 1798.
3. *Preyer N.W. et al.* Phys. Rev. B, 1989, **39**, 11563.
4. *Kastner M.A. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **37**, 111.
5. *Гоголин А.О., Иоселевич А.С.* Письма в ЖЭТФ, 1989, **50**, 468.
6. *Гоголин А.О., Иоселевич А.С.* Письма в ЖЭТФ, 1990, **51**, 154; ЖЭТФ, 1990, (в печати).
7. *Thio T. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **38**, 905.
8. *Thio T. et al.* Phys. Rev. B, 1990, **41**, 201.
9. *Chen C.Y. et al.* Phys. Rev. Lett., 1989, **63**, 2307.
10. *Reagor D. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **38**, 5106.
11. *Reagor D. et al.* Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, 2048.
12. *Мотт Н.Ф., Дэвис Э.* "Электронные процессы в некристаллических веществах", М.: Мир, 1982.
13. *Иоселевич А.С., Рашба Э.И.* ЖЭТФ, 1986, **91**, 1917.
14. *Holstein T.* Ann. Phys., 1959, **8**, 343.