Письма в ЖЭТФ, том 48, вып. 9, стр. 505 – 507 *10 ноября 1988 г.*

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И СВОЙСТВА НОРМАЛЬНОЙ ФАЗЫ НОВЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Л.П.Горьков, А.В.Сокол

В двухзонной модели для металлооксидных сверхпроводников получены основные характеристики магнитных взаимодействий.

Пока неясно, насколько связаны между собой нормальные и сверхпроводящие свойства новых материалов. Эксперименты для $La_{2-x}Sr_xCuO_y$, а также для $YBa_2Cu_3O_{6,5+x}$ показывают, что при "стехиометрическом" составе существенны сильные кулоновские корреляции, приводящие к локализации электронов. Большинство теоретических работ использует поэтому модель Хаббарда. Эта модель, вероятно, недостаточна, чтобы объяснить набор экспериментальных данных, в частности, металлический характер проводимости в допированных LaSrCuO, и в [1] было предложено, помимо состояний $d_{x^2-y^2}$ Cu, учитывать кислородные p-орбитали. Ниже для определенности будем иметь ввиду свойства лантановых систем, в качестве носителей всюду выступают дырки.

Наиболее важным фактом с нашей точки зрения является резкое изменение числа носителей в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при $x \sim 0{,}15$ до значений, отвечающих одной дырке на элементарную ячейку [3]. Возможность интерпретации такого перехода мы будем искать в рамках модели дырочного спектра [2], содержащего как локализованные, так и делокализованные состояния. В [2] постулируется существование фононной степени свободы Q, взаимодействие которой $V_Q Q$ с некоторым уровнем ϵ' велико. Если на уровень ϵ' помещена дырка, уровень опускается (псевдоэффект Яна–Теллера), результирующее положение захваченного электрона $\epsilon_0 = \epsilon' - V_Q^2/2M\Omega^2(x)$. Здесь ϵ' соответствует конфигурации d^{10} на атоме Cu ($Q = 0$). Жесткость системы $M\Omega^2(x)$, вообще говоря, зависит от допирования x. Мы считаем, что в системе присутствуют делокализованные зонные состояния, связанные с движением по кислороду. При конфигурации на меди d^{10} эта зона наполовину заполнена. Спектр дырок будем отсчитывать от минимума в точке $p = 0$.

Поскольку стехиометрический La_2CuO_4 экспериментально является антиферромагнетиком, мы примем, что ϵ_0 лежит ниже зоны проводимости, каждый уровень однократно занят, и автолокализованные состояния являются аналогами хаббардовских центров [4]. Если $\Omega(x)$ убывает с допированием, уровень поднимается, пересекается с зоной проводимости и может выйти из нее. В последнем случае он перестает играть роль вообще. В лантановых соединениях действительно имеется фононный пик, равный 250 см$^{-1}$ для металлических образцов и 150 см$^{-1}$ в диэлектрической магнитной фазе (см., например, в [5]). В [2] обсуждалась ситуация, когда ϵ_0 лежит над дном кислородной зоны. Теперь мы более подробно рассмотрим случай, когда электроны остаются локализованными, что в этой модели могло бы отвечать свойствам La_2CuO_4.

Если вероятность выхода электрона с локализованного уровня достаточно мала, то эта модель эквивалентна периодическому гамильтониану Андерсона:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \epsilon_{\mathbf{p}} a^+_{\mathbf{p}\sigma} a_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_n \{ \epsilon_0 \sum_\sigma d^+_{n\sigma} d_{n\sigma} + U d^+_{n\uparrow} d^+_{n\downarrow} d_{n\downarrow} d_{n\uparrow} \} +$$

$$+ \frac{V}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{p}n\sigma} \{ a^+_{\mathbf{p}\sigma} d_{n\sigma} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n) + d^+_{n\sigma} a_{\mathbf{p}\sigma} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_n) \} , \qquad (1)$$

($N^{-1/2}$ – нормировочный множитель). Согласно [2], гибридизационный член V имеет малость в меру того, что возникновение локального уровня связано с перестройкой ионной подсистемы. Взаимодействие U на центре мы будем предполагать большим.

В рамках этого гамильтониана, считая гибридизацию V малой, мы получили ряд выражений, характеризующих взаимодействия в системе локализованных спинов. Оператор s–d-обмена имеет вид:

$$\frac{V^2/N}{\epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_0}\left(\frac{1}{2} + \mathbf{S}\,\vec{\sigma}_{\sigma'\sigma}\right)\exp\{i\mathbf{R}_n(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\}\, a^{+}_{\mathbf{p}'\sigma'} a_{\mathbf{p}\sigma}\,, \tag{2}$$

где $\mathbf{S}$ – спин локализованного электрона, $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули. В (2) s–d-взаимодействие имеет антиферромагнитный знак. Матричный элемент перескока между центрами m и n

$$t_{mn} = -\sum_{\mathbf{p}} \frac{V^2/N}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_0}\exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}_{mn}). \tag{3}$$

Обменное взаимодействие между ячейками m и n $\mathcal{H}_{\text{обм}} = -\sum_{n\neq m} J(R_{mn})\mathbf{S}_m\mathbf{S}_n$,

$$J(R) = -2\sum_{\mathbf{p}} \frac{V^2/N}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_0}\exp(i\mathbf{p}\mathbf{R})\sum_{\mathbf{p}'}\frac{V^2/N}{(\epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_0)^2}\exp(-i\mathbf{p}'\mathbf{R})\,, \tag{4}$$

также имеет антиферромагнитный характер.

Извлечь информацию о свойствах основного состояния системы можно, уточнив вид дырочного спектра, который предполагается существенно двумерным с минимумом в точке $\mathbf{p}=0$ и максимумом при $\mathbf{p}=\mathbf{Q}_0$, где $\mathbf{Q}_0=(\pi/a,\pi/a)$, a – постоянная решетки в плоскости. "Эффективные массы" вблизи $\mathbf{p}=0$ и $\mathbf{p}=\mathbf{Q}_0$ – m_H и m_B соответственно, ширина зоны равна D. Щель между дном кислородной зоны и локализованными состояниями обозначим через Δ. Ниже мы будем предполагать $V \ll \Delta \ll D \sim (a^2 m_{H,B})^{-1}$.

Введем параметры

$$\lambda = \frac{V^2 a^2 m_H}{2\pi\Delta}\,, \qquad \eta = Da^2 m_H/4, \qquad \nu = m_B/m_H \tag{5}$$

(для $2D$ спектра сильной связи η и ν равны 1). Интеграл перескока и обменный интеграл при $R \gg R_0 = (2m_H\Delta)^{-1/2}$

$$t(R) = -\lambda\Delta(2\pi R_0/R)^{1/2}\exp(-R/R_0), \quad J(R) = -2\lambda^2\pi\Delta\exp(-2R/R_0). \tag{6}$$

Характерная длина R_0, вообще говоря, может быть больше межатомных расстояний. В стандартном приближении среднего поля для точки Нееля найдем

$$T_N = {}^1/_2(J(\mathbf{q}=\mathbf{Q}_0) - J(R=0)) = \lambda^2\Delta(\ln(\pi^2 D/8\eta\Delta) - \pi/2\eta) \tag{7}$$

($J(\mathbf{q})$ – фурье-компонента от (4)). Логарифм в (7) обязан предположенной двумерности спектра. Основное состояние выбрано в виде антиферромагнитной структуры с вектором $\mathbf{Q}_0$ Выше T_N восприимчивость ведет себя по закону $\chi^{-1} \sim T + \theta$, где

$$\theta = -{}^1/_2(J(\mathbf{q}=0) - J(R=0)) = \lambda^2 D\pi/4\eta. \tag{8}$$

При малых волновых векторах $q \ll Q_0$ спектр магнонов имеет вид:

$$\omega(q) = (qa)\frac{\pi\lambda^2}{4\eta}\left[\frac{D\Delta}{\eta\nu}\right]^{1/2} \tag{9}$$

Максимальная частота магнона порядка

$$\omega_{max} \approx \lambda^2\pi\Delta/\eta. \tag{10}$$

Предположив η и $\nu \sim 1$ (но $\Delta \ll D$), найдем, что в нашем случае выполняются следующие соотношения:

$$\omega_{max} < T_N < a^{-1}\, d\omega/dq\,|_0 < \theta, \tag{11}$$

в отличие от приближения ближайших соседей, когда все эти величины порядка обменного интеграла, J .

Величина J экспериментально оценивается как $J \sim$ 1000 K. В формулах (7 – 10), таким образом, имеется значительное количество параметров, которые можно выбрать так, чтобы при этом V и Δ оставались еще малы (и $\lambda \ll 1$). Напомним, что малость Δ предполагается существенной постольку, поскольку интервал концентрации Sr в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ отвечает $x <$ 0,15.

Авторы обязаны Г.М.Элиашбергу за обсуждение.

Литература

1. *Emery V.G.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 2794.
2. *Горьков Л.П., Сокол А.В.* Письма в ЖЭТФ, 1987, **46**, 333.
3. *Ong N.P. et al.* Phys. Rev. B, 1987, **35**, 8807.
4. *Kamimura H.* Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, L627.
5. *Kitazawa K. et al.* Physica C, 1988, **153**, 9.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 октября 1988 г.