

Влияние допирования на электронные и магнитные характеристики плоскости CuO_2

© Ю.Ю. Тарасевич, И.В. Водолазская*

Астраханский государственный педагогический университет,
414050 Астрахань, Россия

*Астраханский государственный технический университет,
414025 Астрахань, Россия

(Поступила в Редакцию 16 июня 1997 г.)

В рамках метода среднего поля рассматривается влияние допирования на зонную структуру, положение уровня Ферми, частоту плазменных колебаний, магнитные свойства слоя CuO_2

В настоящее время считается общепризнанным, что свойства купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в основном определяются плоскостью CuO_2 . Остальные структурные элементы обеспечивают оптимальное состояние купратного слоя. Электронные состояния, формирующие спектр вблизи уровня Ферми, — $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$ - и $\text{O}2p_\sigma$ -орбитали.

В недопированном и слабо допированном состояниях купратные ВТСП являются антиферромагнетиками. Для описания их свойств необходимо учитывать сильные кулоновские корреляции. Для описания электронного строения слоя CuO_2 широко применяется модель Эмери [1]. В общем случае модель Эмери не имеет аналитического решения, поэтому ее анализ проводится либо на основе результатов численных расчетов кластеров, либо путем использования некоторых упрощающих предположений. Существенным недостатком кластерных методов является ограничение на размер кластеров. Так, в методе точной диагонализации размер кластеров составляет 10–20 атомов, а в методе Монте-Карло — 20–200 атомов. В качестве примеров подобных расчетов можно назвать работы [2–4]. В последнее время для анализа влияния допирования на свойства ВТСП активно применяется метод среднего поля.

В цикле работ [5–8] для анализа электронного строения и магнитных характеристик слоя CuO_2 был применен неограниченный метод Хартри–Фока (НХФ). При этом плоскость CuO_2 рассматривалась как альтернативная структура. Приведенное исследование показало, что применение метода НХФ позволяет качественно правильно передать особенности электронного строения слоя CuO_2 . Проведенный анализ [8], в том числе сравнение результатов расчетов по методу НХФ с результатами точной диагонализации гамильтониана для периодических кластеров, показал, что в методе НХФ учитывается существенная часть электронных корреляций. С другой стороны, простота метода позволяет получить ряд важных результатов в аналитическом виде.

В настоящей работе мы применяем развитый в [5–8] подход для анализа влияния допирования на электронный спектр, положение уровня Ферми и антиферромагнитный порядок в слое CuO_2 .

Если учитывать только кулоновское взаимодействие электронов на атомах меди и взаимодействие только

ближайших соседей, то модельный гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon_d \sum_{i\sigma} a_{di\sigma}^+ a_{di\sigma} \\
 & + \varepsilon_p \sum_{j\sigma} a_{pj\sigma}^+ a_{pj\sigma} + t \sum_{ij\sigma} (a_{pi\sigma}^+ a_{pj\sigma} + \text{h.c.}) \\
 & + U \sum_i a_{di\uparrow}^+ a_{di\uparrow} a_{di\downarrow}^+ a_{di\downarrow}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где ε_d , ε_p — одноэлектронные энергии $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$ - и $\text{O}2p_\sigma$ -состояний, t — матричный элемент перескока медь–кислород, U — энергия кулоновского отталкивания дырок на узлах меди, $a^+(a)$ — операторы рождения (уничтожения) дырок в соответствующем состоянии. Адекватность данного модельного гамильтониана и анализ того, как влияют на результаты расширение базиса (включение $\text{Cu}3d_z^2$ -орбиталей) и учет взаимодействия вторых соседей ($p-p$ -взаимодействия), подробно рассматривались в [8]. Относительно величины параметров гамильтониана различные авторы приводят существенно отличающиеся (до 2 раз) результаты. Мы будем полагать $U = 7 \text{ eV}$ и $V_{pd\sigma} = 1.85 \text{ eV}$ ($t = \sqrt{3}V_{pd\sigma}/2 \approx 1.6 \text{ eV}$); кроме того, будем считать, что $\varepsilon_p = \varepsilon_d = 0$. Последнее предположение, не оказывая принципиального влияния на результаты, позволяет существенно облегчить расчеты.

Как было показано в [5], электронный спектр купратного слоя описывается уравнением

$$\varepsilon^{\lambda\nu} = \lambda \left(w + \delta^2/2 + \nu \left((\delta^2/2)^2 + w\delta^2 + z^2 \right)^{1/2} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь λ , $\nu = \pm 1$, $w = 3V_\sigma^2$, $z = w \cos k_x a/2 \cos k_y a/2$, a — период решетки, k_x , k_y — компоненты квазиволнового вектора, δ — ширина запрещенной щели, которая должна быть определена из самосогласованного расчета

$$\delta = U(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})/2,$$

где $n_{di} = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \int g_{di}(\varepsilon) \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k})) d\mathbf{k}$ — числа заполнения, $\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k}))$ — ступенчатая функция, соответствующая распределению Ферми при $T = 0$, $g_{di}(\varepsilon)$ — плотность состояний.

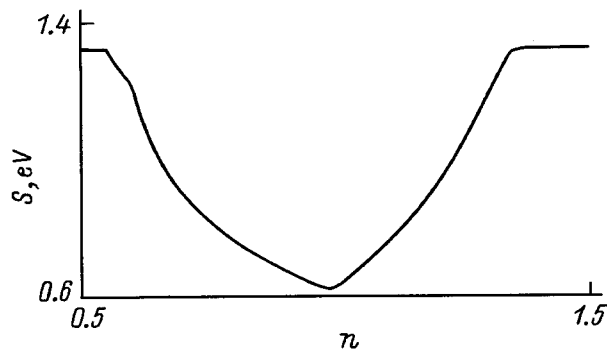


Рис. 1. Зависимость ширины S нижней хаббардовской зоны от концентрации носителей.

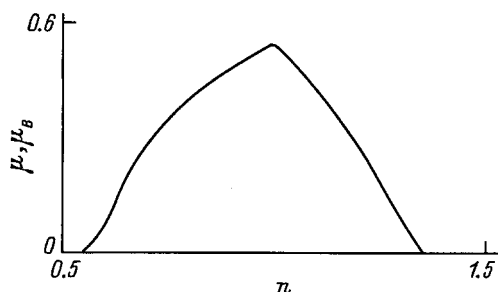


Рис. 2. Зависимость магнитного момента на атомах меди (в магнетонах Бора) от концентрации носителей.

Электронный спектр разбит на несколько зон: две зоны по краям спектра, состоящие преимущественно из $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$ -состояний с заданной ориентацией спина, — верхняя и нижняя хаббардовские зоны (им соответствуют $\nu = +1$, $\lambda = \pm 1$ в законе дисперсии (2)); две сильно гибридизованные зоны в центре спектра — зона коррелированных состояний и связующая зона ($\nu = -1$, $\lambda = \pm 1$), а также несвязующие p_σ -состояния в центре спектра при $\varepsilon = 0$. Наименования зон даны в соответствии с [9].

Самосогласованный расчет [5] показывает, что при выбранных значениях параметров для недопированных ВТСП $\delta \approx 2\text{eV}$ и магнитный момент атомов меди $\mu = (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})\mu_B \approx 0.5\mu_B$, что находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными [10].

Допирование (как электронное, так и дырочное) приводит к тому, что ширина запрещенной щели уменьшается и при концентрациях ≈ 0.35 при электронном и ≈ 0.45 при дырочном допировании исчезает (рис. 1). Исчезновение щели сопровождается фазовым переходом из антиферромагнитного в парамагнитное состояние. Поскольку электронный спектр симметричен относительно нуля, этот же график одновременно показывает изменение как верхней, так и нижней хаббардовской зоны. Горизонтальные участки графика соответствуют парамагнитной фазе, когда запрещенная щель исчезла и нижняя зона соприкасается с центральной. Уменьшение щели приводит к уменьшению магнитного момента на

атомах меди (рис. 2) и снижению частоты плазменных колебаний (рис. 3). Резкое уменьшение магнитного момента при увеличении концентрации носителей согласуется с экспериментальными данными, т.е. на качественном уровне модель правильно описывает процесс. Резкое снижение частоты плазменных колебаний при допировании создает предпосылки для реализации плазмонного механизма сверхпроводимости, который был предложен рядом авторов [10,11].

Качественно правильно передается и слабая зависимость положения уровня Ферми от концентрации дырок (пиннинг уровня Ферми) (рис. 4). При переходе от дырочного к электронному допированию происходит перенос уровня Ферми на другую сторону диэлектрической щели. Примечательным является тот факт, что вплоть до концентраций ≈ 0.2 и при электронном, и при дырочном допировании положение уровня Ферми относительно края соответствующей зоны практически не меняется, а смещение уровня Ферми происходит за счет расширения самой зоны. Слабая зависимость положения уровня Ферми относительно края зоны объясняется тем, что вблизи края зоны плотность состояния имеет логарифмическую сингулярность, т.е. малое смещение уровня Ферми соответствует большому изменению концентрации носителей.

Переход в парамагнитную фазу, как и в работах [11,12], происходит при концентрациях, существенно превышающих экспериментальные (≈ 0.02 при дырочном и ≈ 0.14 при электронном допировании [13]). Количественное расхождение с экспериментом, которое получается при различных подходах, свидетельствует о

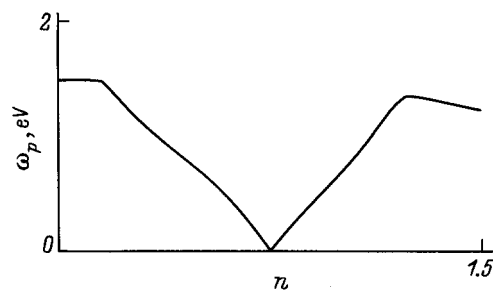


Рис. 3. Зависимость частоты плазменных колебаний от концентрации носителей.

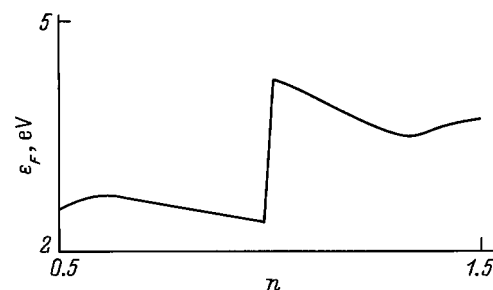


Рис. 4. Зависимость положения уровня Ферми от концентрации носителей.

том, что оно возникает уже на уровне исходной модели и может быть связано со следующими факторами. Во-первых, с тонкими эффектами деформации зон и смещения электронных плотностей, которые можно учесть путем расширения базиса и уточнения параметров модели. Однако, как отмечалось выше, корректная параметризация затруднительна из-за большого разброса приводимых в литературе значений основных параметров. Кроме того, как показывают расчеты [8], расширение базиса и изменение параметризации влияют на зонную структуру незначительно. Во-вторых, с существованием внутри запрещенной щели узкой полосы с металлической проводимостью. Среди причин, которые могут приводить к появлению этой зоны, в [14] называется отщепление примесной полосы от потолка гибридной зоны. Перестройка зонной структуры и появление уровней в запрещенной зоне при образовании кислородных вакансий и замещении атомов рассматривались в [8] и, на наш взгляд, могут являться решающими факторами в формировании электронных и магнитных свойств плоскости CuO_2 .

Список литературы

- [1] V.J. Emery. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [2] В.Ф. Елесин, В.А. Кашурников, Л.А. Опёнов, А.И. Подливаев. *ЖЭТФ* **99**, 1, 237 (1991).
- [3] В.Ф. Елесин, В.А. Кашурников, Л.А. Опёнов, А.И. Подливаев. *ЖЭТФ* **101**, 2, 682 (1992).
- [4] В.Ф. Елесин, В.А. Кашурников. *ЖЭТФ* **106**, 6, 1773 (1994).
- [5] С.А. Просандеев, Ю.Ю. Тарасевич, А.А. Неродо. *ФТТ* **32**, 6, 1761 (1990).
- [6] С.А. Просандеев, Ю.Ю. Тарасевич. *УФЖ* **36**, 3, 434 (1991).
- [7] S.A. Prosandeyev, Yu.Yu. Tarasevich. *Ferroelectrics* **131**, 141 (1992).
- [8] V.M. Loktev, S.A. Prosandeyev, Yu.Yu. Tarasevich. *Phys. Stat. Sol. (b)* **174**, 141 (1992).
- [9] В.Ф. Елесин, Л.А. Опёнов, Е.Г. Холмовский. *ЖЭТФ* **109**, 2, 581 (1996).
- [10] J. Ashkenazi, C.G. Kuper, R. Tyk. *Solid State Commun.* **63**, 12, 1145 (1987).
- [11] Э.А. Пашицкий. Препринт № 7 Ин-та физики АН УССР. Киев (1988).
- [12] А.А. Овчинников, М.Я. Овчинникова. *ЖЭТФ* **110**, 1(7), 342 (1996).
- [13] Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников / Под ред. Д.М. Гинзберга. Мир, М. (1990). 543 с.
- [14] Физические свойства ВТСП. Справочное пособие / Под ред. А.И. Буздина, В.В. Мошалокова. М. (1990). Ч. 1. 328 с.