

УДК 537.362

НЕОДНОРОДНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ И ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ В ОКСИДНЫХ ВТСП

Н. В. Аншукова, А. И. Головашкин, Л. И. Иванова, А. П. Русаков

Показано, что неоднородное распределение электронной плотности в оксидных ВТСП системах обусловлено сверхструктурным зарядовым и антиферромагнитным упорядочением в плоскости CuO_2 . Рассмотрено влияние легирования на форму поверхности Ферми. Установлена связь между сверхструктурным упорядочением и возникновением распределения заряда в виде полосок (так называемых "страйпов"). Показано, что возникновение такого распределения связано с Пайерлсовской неустойчивостью решетки и возникновением диэлектрической Пайерлсовской щели Δ^ (так называемой "псевдощели").*

Недавно были разработаны методики получения качественных монокристаллических образцов различных ВТСП систем. ВТСП системы – это системы, образцы которых в определенном интервале составов являются высокотемпературными сверхпроводниками. Меняя уровень легирования, можно изменять состояние таких систем от диэлектрического до металлического. Наличие качественных образцов позволило провести детальные исследования электронных, фоновых и других характеристик в зависимости от уровня легирования. Эти исследования были выполнены для ВТСП систем типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-\delta}$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8-\delta}$ и других. Были обнаружены новые особенности электронных и фоновых свойств при слабом легировании и вблизи границы перехода диэлектрик–металл. Например, методом ARPES было показано [1, 2], что вблизи границы перехода диэлектрик–металл соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ при $x \geq 0.05$ появляется поверхность Ферми, имеющая в плоскости волновых векторов

(k_x, k_y) широкие плоские участки, параллельные направлению [100] и эквивалентным ему направлениям. При этом площадь сечения возникшей поверхности Ферми не меняется пропорционально уровню легирования x , а сразу имеет конечное значение, близкое к площади сечения при оптимальном легировании. При повышении уровня легирования вплоть до $x \approx 0.15$ поверхность Ферми практически не меняется, увеличивается только интенсивность линий ARPES. И лишь при легировании, превышающем оптимальный уровень, т.е. при $x \geq 0.17$, наблюдается сильное изменение поверхности Ферми, и она становится параллельной направлениям типа [110] при $x \approx 0.25$.

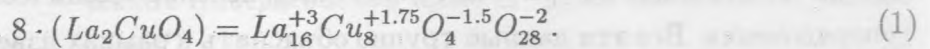
В металлической фазе $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-\delta}$ при слабом легировании ($x \approx 0.07$) методом ARPES было обнаружено сосуществование диэлектрической и металлической фаз на микроскопическом уровне [1, 2]. Т.е. в этих экспериментах в образце одновременно наблюдались две зависимости энергии носителей заряда E от волнового вектора k , одна из которых характерна для чисто диэлектрической фазы, а другая – для металлической фазы при оптимальном легировании. В диэлектрической фазе ($x < 0.05$) остается лишь одна из этих зависимостей $E(k)$ с большей энергией связи, в металлической фазе при сильном легировании ($x \geq 0.15$) – вторая, с меньшей энергией связи.

Совокупность этих и других наблюдений (магнитной сверхструктурной модуляции, как статической, так и динамической [7], отрицательного теплового расширения при низких температурах [8] и т.д.) ставит вопрос о природе сосуществования в ВТСП металлического и диэлектрического состояний на микроскопическом уровне и их взаимном упорядочении. Все эти данные трудно объяснить в рамках известных теоретических моделей с равномерным распределением электронной плотности при легировании. Ниже будет показано, что эти новые данные естественно объясняются, если учесть наличие в диэлектрической фазе зарядового сверхструктурного упорядочения в кислородной подрешетке в дополнение к известному антиферромагнитному упорядочению в подрешетке ионов меди. Будут рассмотрены особенности сверхструктурного упорядочения в кислородной подрешетке и их влияние на форму поверхности Ферми ВТСП систем. Учет такого зарядового сверхструктурного упорядочения в кислородной подрешетке позволяет объяснить природу сосуществования диэлектрической и металлической фаз на микроуровне, наблюдающегося в легированных образцах ВТСП систем.

Диэлектрическое состояние ВТСП систем. Рассмотрим диэлектрическое состояние на примере системы $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-\delta}$ при $x = 0$ и $\delta = 0$. Теоретические расчеты показывают, что исходное состояние этой системы без легирования должно быть металлическим [9]. Согласно расчетам, между нижней и верхней Хаббардовскими зонами,

образованными в основном из $3d$ -состояний меди, находится широкая зона, состоящая преимущественно из $2p$ -состояний кислорода. Наличие такой зоны и делало бы материал металлом. Соответствующий металл называют "прафазой". Как было показано нами ранее [10], в этой прафазе в плоскостях CuO_2 ионы кислорода должны существовать в двух зарядовых состояниях: O^{-2} и $O^{-1.5}$. Это соответствует ионным связям $Cu-O^{-2}$ и ионно-ковалентным связям $Cu-O^{-1.5}$. Упорядочение таких "ковалентных" связей $Cu-O^{-1.5}$ с учетом антиферромагнитного упорядочения ионов меди приводит к удвоению периода решетки этой металлической "прафазы" в плоскости CuO_2 в направлении $[100]$ и эквивалентных ему направлениях. Это эквивалентно возникновению волны зарядовой плотности в подрешетке ионов кислорода. При этом у потолка нижней Хаббардовской зоны образуется узкая кислородная зона (вместо широкой расчетной зоны) и возникает диэлектрическая щель $E_g \sim 2 \text{ эВ}$. В результате в ВТСП системах без легирования реально наблюдается диэлектрическая фаза, а не металлическая "прафаза".

В соседней плоскости CuO_2 упорядочение таких ковалентных связей $Cu-O^{-1.5}$ осуществляется в перпендикулярном направлении. При этом диэлектрическая щель возникает и в направлении оси "с". В итоге получается новая элементарная ячейка, которая помимо ионов O^{-2} содержит 4 иона $O^{-1.5}$. Полная химическая формула, описывающая диэлектрическое соединение La_2CuO_4 с учетом удвоения во всех трех направлениях, имеет вид:



Такая формульная единица соответствует элементарной ячейке диэлектрического соединения La_2CuO_4 .

По сути, рассмотренный выше механизм удвоения периода решетки является одним из проявлений хорошо известного эффекта Яна-Теллера, типичного для кислородных соединений меди. При этом снимается вырождение между $2p_x$ и $2p_y$ состояниями ионов кислорода в плоскости CuO_2 . Снятие вырождения сопровождается как упругой деформацией, так и перераспределением заряда между ионами. В системе достигается выигрыш энергии с типичными значениями $\sim 1 \text{ эВ}$ на ячейку [11]. В нашем случае это проявляется в образовании запрещенной зоны $E_g \sim 2 \text{ эВ}$. Как показывают нейтронографические эксперименты [12, 13], характерное смещение ионов кислорода в плоскости CuO_2 в случае периодической модуляции, соизмеримой с периодом решетки, составляет величину порядка 0.004 \AA . Такое изменение трудно заметить при существующей точности, измеряя дисперсию фононов или делая рентгеноструктурный анализ.

Четыре иона кислорода $O^{-1.5}$ на ячейку, удвоенную в трех направлениях, – это минимальное число ионов, при котором обеспечивается снятие вырождения для всех кислородных октаэдров. Удвоение периодов решетки приводит к появлению нового вектора обратной решетки $\mathbf{G}_2 = \mathbf{G}/2 = (\pi/a)[100]$, где $\mathbf{G} = (2\pi/a)[100]$ – вектор обратной решетки без удвоения периода, a – расстояние $Cu-Cu$ в плоскости CuO_2 . Как независимо показано в работе [14], такое удвоение следует из общего теоретического анализа для ВТСП систем.

Поскольку ионы $O^{-1.5}$ слабее связаны с решеткой по сравнению с ионами O^{-2} , их электронные состояния являются ближайшими к уровню химпотенциала μ диэлектрика, т.е. они находятся у потолка сложной валентной зоны, состоящей из узкой кислородной зоны и нижней Хаббардовской зоны. Рассмотренное выше упорядочение этих слабо связанных ионов $O^{-1.5}$ приводит, как уже отмечалось, к появлению узкой (~ 0.3 эВ), практически чисто кислородной, валентной зоны, образованной из $2p$ -состояний кислорода $O^{-1.5}$ и лежащей выше широкой (~ 3 эВ) смешанной медь-кислородной Хаббардовской зоны $Cu(3d)-O^{-2}(2p)$, как схематично показано на рис. 1а. Характерные экспериментальные значения энергий [15] приведены для наглядности на том же рис. 1а. Малая ширина верхней кислородной валентной зоны $2pO^{-1.5}$ определяется относительно слабым перекрытием $2p$ -состояний $O^{-1.5}$, так как в элементарной ячейке содержится только 4 таких иона. В то же время число ионов O^{-2} в ячейке равно 28.

Верхняя валентная кислородная зона $2pO^{-1.5}$ содержит $4 \cdot 1.5 = 6$ электронов на ячейку. Эти электроны заполняют три зоны Бриллюэна для плоской квазидвумерной решетки, включающей две плоскости CuO_2 . Три первые, заполненные электронами, зоны Бриллюэна для случая диэлектрика показаны на рис. 2а. На третью зону Бриллюэна приходится два электрона, т.е. в пересчете на один ион меди в формульной единице (1) это соответствует $x = x_c = 2/8 = 0.25$ электрона.

Легирование и электронная структура. При слабом легировании стронцием в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ должны были бы появиться дырочные носители у потолка узкой кислородной валентной зоны. При вырождении этих носителей поверхность Ферми должна была бы проходить вблизи границ внутри третьей зоны Бриллюэна. При этом расстояние между границей третьей зоны Бриллюэна и поверхностью Ферми должно было бы быть пропорциональным концентрации легирующей примеси, т.е. x . Однако, как уже отмечалось выше, ARPES обнаруживает поверхность Ферми на значительном удалении от границ третьей зоны Бриллюэна, как показано на рис. 2б. Например, между точками $(0, 1)$ и $(1/2, 1)$ граница поверхности Ферми проходит примерно посередине,

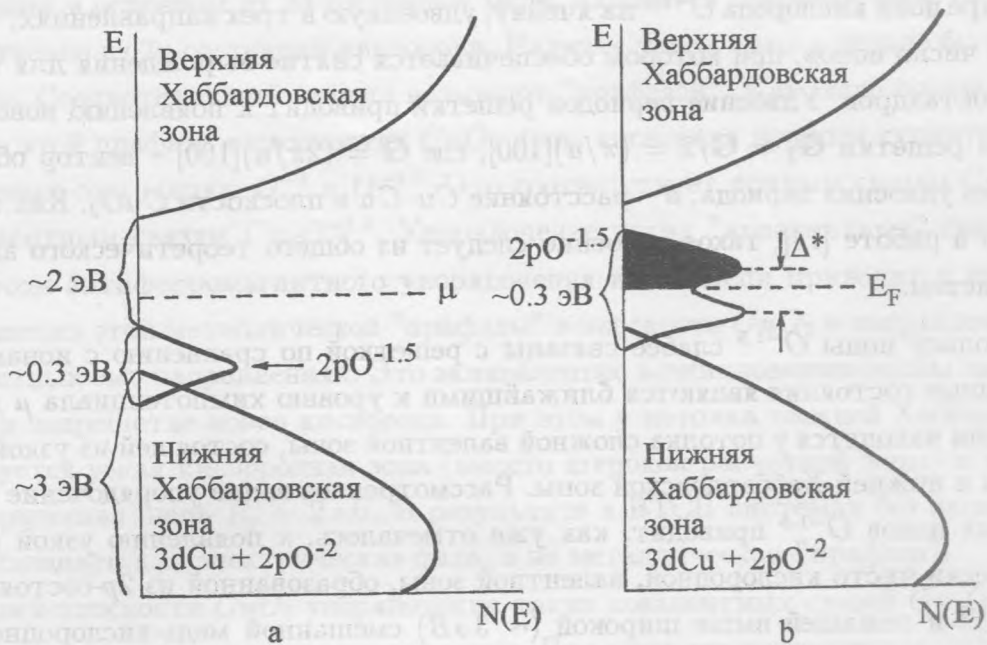


Рис. 1. Схема энергетических зон купратных ВТСП систем: а. Диэлектрическое состояние; б. Металлическое состояние вблизи оптимального легирования. Стрелка указывает на узкую кислородную зону $2pO^{-1.5}$, E – энергия, μ – химический потенциал, E_F – энергия Ферми, $N(E)$ – плотность электронных состояний, Δ^* – Пайерлсовская щель. Темная область соответствует состояниям, занятым дырками при легировании.

т.е. вблизи точки $(1/4, 1)$. Эта граница практически не смещается при легировании вплоть до оптимального легирования $x = 0.15$ [1]. Кроме того, как уже отмечалось, при слабом легировании ($0.05 < x < 0.13$) наблюдается сосуществование металлической и диэлектрической фаз [2].

Эти и другие новые экспериментальные данные можно объяснить в рамках обсуждаемой нами модели. Результаты, представленные на рис. 2, получаются прямыми расчетами электронной зонной структуры. Полученные в этих расчетах значения дисперсии $E(\mathbf{k})$ верхних валентных зон можно аппроксимировать в рамках метода сильной связи формулой типа [16 – 18]:

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) - t_{\perp}(\cos k_x - \cos k_y)^2/4, \quad (2)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ – безразмерный волновой вектор для квазидвумерной обратной решет-

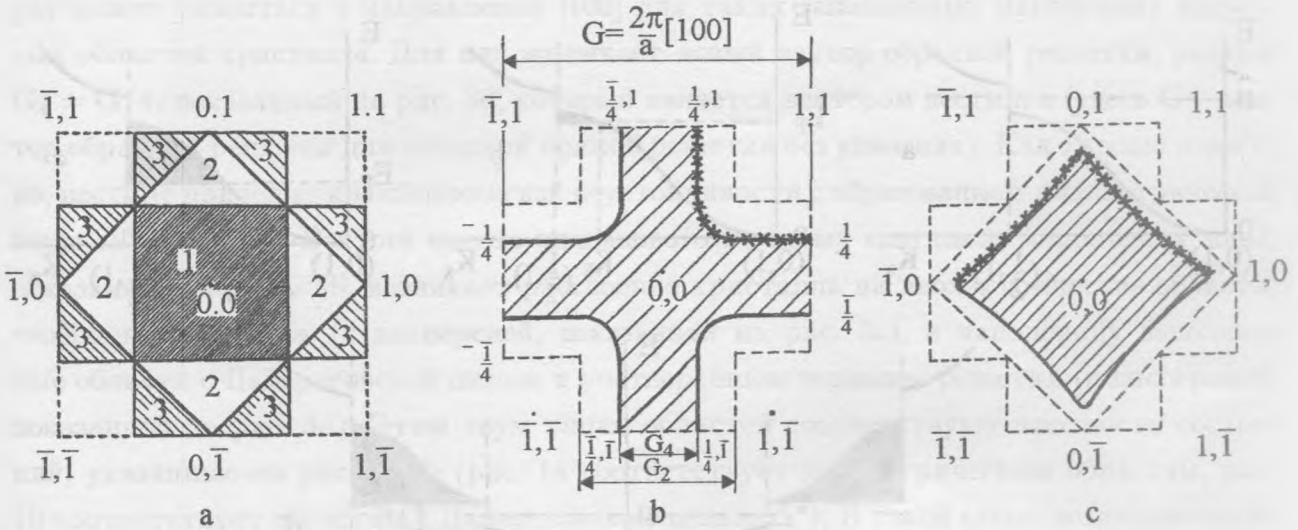


Рис. 2. Зоны Бриллюэна и форма поверхности Ферми в купратных ВТСП при разных уровнях легирования. Точки симметрии указаны в единицах π/a (a – минимальное расстояние $Cu-Cu$). Крестиками показаны экспериментальные данные, полученные методом ARPES [1, 2]. а. Первые три заполненные зоны Бриллюэна (указаны цифрами) для плоской решетки CuO_2 с удвоенными периодами в случае диэлектрика. Штриховой линией показана первая зона Бриллюэна для плоской решетки CuO_2 без удвоения периодов. б. Поверхность Ферми (сплошные линии) для случая $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при $0.05 \leq x \leq 0.15$. Пунктирными линиями показаны границы третьей зоны Бриллюэна. Заштрихованы заполненные электронные состояния. Указаны векторы обратной решетки $G_4 = G_2/2 = G/4$, где $G = (2\pi/a) [100]$. в. Поверхность Ферми при сильном ($x > 0.25$) легировании. Пунктир – границы второй и третьей зон Бриллюэна. При $x = 0.25$ поверхность Ферми совпадает с границами второй зоны Бриллюэна. Заштрихованы заполненные электронные состояния при $x = 0.3$.

ки, нормированный на период решетки, t, t', t'' – интегралы перекрытия с ближайшими, вторыми и третьими соседними ионами соответственно, t_{\perp} – интеграл перекрытия для взаимодействия между соседними плоскостями CuO_2 . При этом рассчитанные максимумы валентных зон совпадают с границами зон Бриллюэна для диэлектрического состояния (рис. 2а) при значениях параметров: $t = 386 \text{ мэВ}$, $t'/t = -0.272$, $t''/t = 0.223$, $t_{\perp} = 150 \text{ мэВ}$.

При легировании расчеты [16] приводят к форме поверхности Ферми, показанной на рис. 2в. Эта форма получена для уровня легирования $x = 3x_c/4 = 0.1875$, когда параметры, входящие в формулу (2), равны $t = 0.5 \text{ эВ}$, $t'/t = -0.3$, $t''/t = 0.2$, $t_{\perp} = 0.15 \text{ эВ}$.

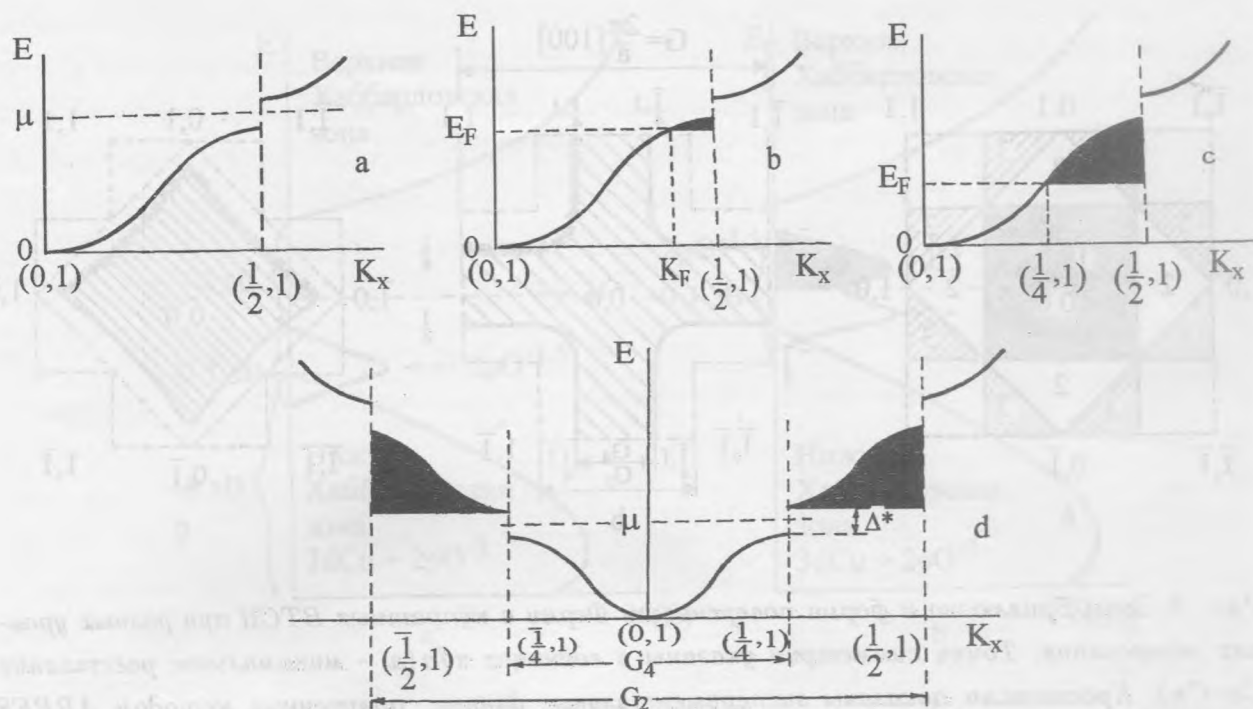


Рис. 3. Дисперсионные кривые $E(\mathbf{k})$ в направлении между точками $(0, 1)$ и $(1/2, 1)$. а. Случай диэлектрика. б. Случай слабого легирования в модели равномерного распределения дырочных носителей. Заштрихованы состояния, заполненные дырками. в. Случай половинного заполнения дырками энергетической зоны по импульсу, т.е. до точки $(1/4, 1)$. д. Образование Пайерлсовской щели Δ^* и нового вектора обратной решетки при нестинге на вектор $\mathbf{G}_4 = \mathbf{G}/4$.

Используя значения полученных интегралов перекрытия, можно оценить дисперсию $E(\mathbf{k})$ для линии между точками $(0, 1)$ и $(1/2, 1)$. Эта дисперсионная кривая показана на рис. 3 как для чистого диэлектрика, так и при легировании. На рис. 3а точка $(1/2, 1)$ соответствует границе третьей зоны Бриллюэна. Ширина заполненной электронами зоны составляет ~ 0.3 эВ. При слабом легировании дырки должны были бы появиться у потолка этой валентной зоны, как показано на рис. 3б. И при их вырождении уровень Ферми должен был бы появиться вблизи границ третьей зоны Бриллюэна. Однако для рассматриваемого нами случая узкой зоны и при слабом экранировании оказывается энергетически выгоднее заполнить эту зону в отдельных областях кристалла до половины вектора обратной решетки, как показано на рис. 3в, за счет освобождения от дырочных носителей каких-то промежуточных областей. При этом период решетки еще

раз может удвоиться в направлении [100] для таких заполненных наполовину дырочных областей кристалла. Для них возникает новый вектор обратной решетки, равный $G_4 = G/4$, показанный на рис. 3d, который является вектором нестинга (здесь G – вектор обратной решетки для исходной прямой решетки без удвоения). Как хорошо известно, нестинг приводит к Пайерлсовской неустойчивости с образованием диэлектрической щели Δ^* (рис. 3d). В итоге вместо одинакового по всему кристаллу заполнения зоны, показанного на рис. 3b, возникает расслоение кристалла на диэлектрические области, свободные от дырок (с дисперсией, показанной на рис. 3a), и наполовину заполненные области с Пайерлсовской щелью и учетверенным периодом решетки (с дисперсией, показанной на рис. 3d). Этим двум типам областей соответствуют плотности состояний, указанные на рис. 1a, b (рис. 1a соответствует диэлектрическим областям, рис. 1b соответствует областям с Пайерлсовской щелью Δ^*). В такой схеме возникает определенный выигрыш в энергии: в диэлектрических областях уменьшается кулоновская энергия отталкивания дырок, а в областях с Пайерлсовской щелью понижается кинетическая энергия за счет образования щели Δ^* .

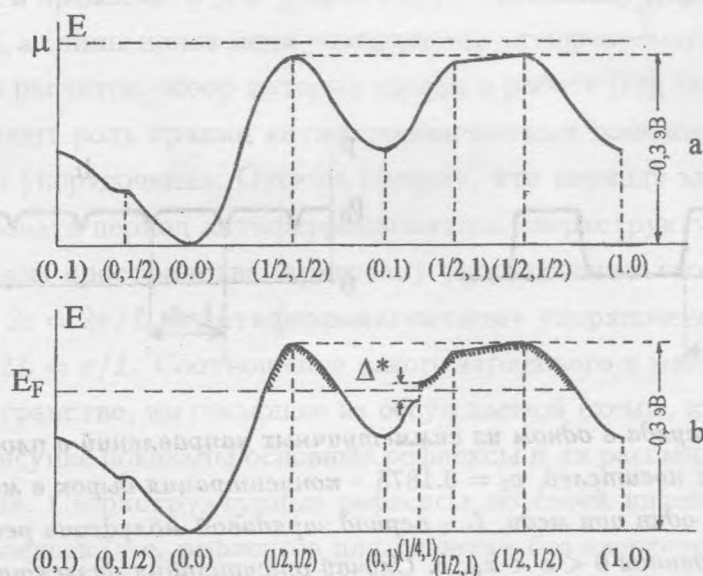


Рис. 4. Схематичные кривые дисперсии $E(k)$ верхней валентной зоны вдоль некоторых симметричных направлений зон Бриллюэна. а. Диэлектрическое состояние. б. Металлическое состояние при $x = x_0$. Заштрихованы состояния, заполненные дырочными носителями.

Схематичные кривые дисперсии верхней валентной зоны $E(k)$ вдоль некоторых линий симметрии зон Бриллюэна, полученные на основе анализа формулы (2), показаны

на рис. 4а для диэлектрического состояния и на рис. 4б для металлического состояния при $x = x_0 = 0.1875$.

Поскольку легирование в случае $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ обеспечивается равномерно распределенными ионами стронция, то при неравномерном распределении дырок, как следует из вышеописанной схемы, возникает дополнительное кулоновское взаимодействие между металлическими областями, которое должно приводить к их упорядочению (рис. 5). Такое упорядочение действительно наблюдалось на эксперименте [12, 19 – 21]. Это упорядочение может быть динамическим, как в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [19], или статическим, как в $(La, Nd)_{2-x}Sr_xCuO_4$ [12, 20] и $La_2CuO_{4+\delta}$ [21]. Эксперимент [22] показывает, что такое упорядочение имеет полосковую структуру (типа "страйпов"). Такие полосы направлены либо вдоль вектора [100], либо вдоль [010] и разделены пространственно [22]. В нашем случае для элементарной ячейки, содержащей две плоскости CuO_2 , естественно считать, что направление [100] характерно для одной плоскости CuO_2 , а направление [010] – для соседней плоскости. Такое упорядочение полосок в двух взаимно перпендикулярных направлениях для соседних плоскостей CuO_2 для частного случая $(La, Nd)_{2-x}Sr_xCuO_4$ получено в работе [12] из анализа экспериментальных нейтронографических данных.

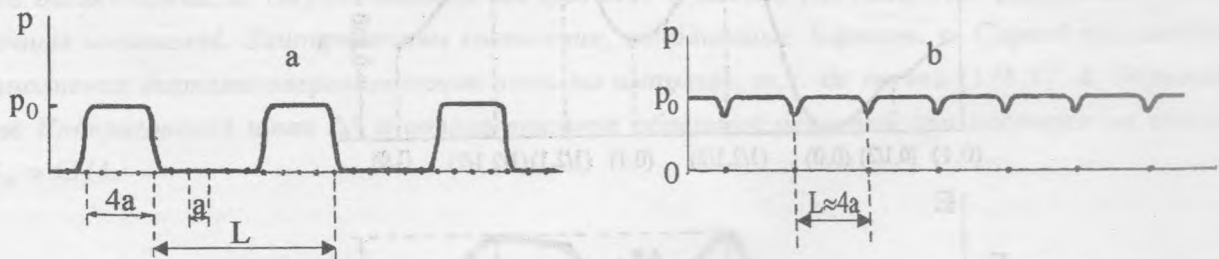


Рис. 5. Распределение заряда в одном из симметричных направлений в плоскости CuO_2 . p – концентрация дырочных носителей, $p_0 = 0.1875$ – концентрация дырок в металлической полоске, приходящаяся на один ион меди, L – период зарядовой модуляции решетки. а. Случай промежуточного легирования $0 < x < x_0$. б. Случай отсутствия диэлектрических прослоек между металлическими полосками ($x \approx x_0 = 0.1875$).

На рис. 5 схематично показано распределение заряда в одном симметричном направлении в плоскости CuO_2 . Точно такая же картина будет наблюдаться и в перпендикулярном направлении в соседней плоскости CuO_2 . Как видно из рис. 2б условию нестинга с вектором $G_4 = G/4$ удовлетворяет значительная часть поверхности Ферми,

т.е. рассмотренная картина верна для всех этих состояний. Исключение составляют лишь области в окрестности точек типа $(1/4, 1/4)$. Отметим также, что вдоль полосок Пайерлсовская щель не образуется.

Металлическая проводимость легированных образцов в этой схеме связана с тем, что в окрестности точек типа $(1/4, 1/4)$ Пайерлсовская щель не образуется. С учетом этого на рис. 1b Пайерлсовская щель Δ^* нарисована частично заполненной и указан уровень Ферми E_F , а не химпотенциал.

Зарядовое упорядочение, показанное на рис. 5, должно сопровождаться упругой деформацией с тем же периодом. Величина этой деформации (например, смещение ионов кислорода в плоскости CuO_2), как следует из экспериментов по нейтронной дифракции в $(La, Nd)_{2-x}Sr_xCuO_4$ [12, 13], составляет величину примерно 0.004 \AA для $x = 0.12$. Обозначим через L период зарядового упорядочения на рис. 5. Величина L связана с уровнем легирования x как

$$L = 3a/4x. \quad (3)$$

Здесь x меняется в пределах: $0 \leq x \leq x_0 = 0.1875$. Поскольку деформация происходит в плоскостях CuO_2 , а спины ионов меди упорядочены антиферромагнитно, то, как следует из теоретических расчетов, обзор которых сделан в работе [12], заряженные металлические области играют роль границ антиферромагнитных доменов с разной фазой антиферромагнитного упорядочения. Отсюда следует, что периоду зарядовой модуляции L будет соответствовать период антиферромагнитной сверхструктурной модуляции, равный $2L$. В обратном пространстве зарядовому упорядочению соответствует вектор 2ϵ , модуль которого $2\epsilon = 2\pi/L$, а антиферромагнитному упорядочению – вектор ϵ , модуль которого $\epsilon = 2\pi/2L = \pi/L$. Соотношение такого зарядового и магнитного упорядочения в обратном пространстве, вытекающее из обсуждаемой схемы, проиллюстрировано на рис. 6. На этом рисунке показаны основные рефлексы и их расщепление при сверхструктурной модуляции. Сверхструктурные рефлексы по своей интенсивности отличаются от основных рефлексов (т.е. рефлексов для решетки без сверхструктурной модуляции) на много порядков. Все сверхструктурные рефлексы по отдельности наблюдались экспериментально [12, 14, 20]. В частности, рефлексы из-за удвоения периодов решетки были обнаружены в работе [14]. Рефлексы, возникающие из-за антиферромагнитного упорядочения ионов меди, и рефлексы 2ϵ , отражающие периодическое распределение металлических областей с периодом L , наблюдались в работах [12, 20] и других. Интенсивность, например, рефлексов 2ϵ в миллион раз меньше интенсивности основных

Брегговских рефлексов [12]. Интенсивность сверхструктурных рефлексов из-за удвоения периодов может быть еще меньше. По-видимому, по этой причине до сих пор отсутствуют экспериментальные данные, где бы присутствовали одновременно все указанные на рис. 6 рефлексы.

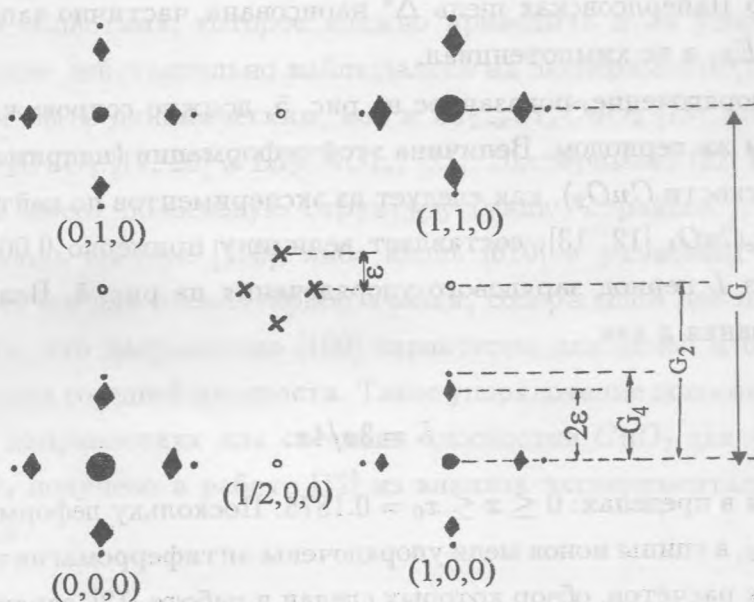


Рис. 6. Картина Брегговских рефлексов и их расщепления для обратной решетки оксидных ВТСП в области сосуществования металлической и диэлектрической фаз, вытекающая из рассматриваемой модели сверхструктурного упорядочения: большие сплошные кружки (●) – рефлексы решетки без сверхструктурной модуляции; малые открытые кружки (○) – рефлексы из-за удвоения периодов решетки; точки (·) – рефлексы из-за учетверения периодов решетки; ромбы (◇) – рефлексы, отражающие периодическое распределение металлических областей с периодом L , где $2\epsilon = 2\pi/L$; крестики (×) – рефлексы из-за антиферромагнитного упорядочения ионов меди. Положения точек симметрии указаны в единицах $2\pi/a$; $G_4 = G_2/2 = G/4 = (2\pi/a)/4$; $0 \leq 2\epsilon \leq G_4$. Интенсивность сверхструктурных рефлексов на много порядков меньше интенсивности основных Брегговских рефлексов.

Зависимость величины 2ϵ от уровня легирования x будет меняться от $2\epsilon = 0$ при $x = 0$, т.е. при $L \rightarrow \infty$, до $2\epsilon = G/4$ при $L = 4a$ (здесь G – абсолютная величина вектора \mathbf{G}). Последний случай показан на рис. 5б и соответствует отсутствию диэлектрических областей между металлическими полосами. Весь кристалл будет при этом состоять из областей с учетверенным периодом решетки. При этом, как показано на рис.

7а, дырками заполняется 3/4 состояний третьей зоны Бриллюэна (эта площадь на рис. 7а заштрихована). Полное заполнение третьей зоны Бриллюэна достигается при числе дырок $x = 0.25$ на один ион меди. Заполнение 3/4 состояний этой зоны соответствует уровню легирования $x = x_0 = 0.25 \cdot 3/4 = 0.1875$. Зависимость величины сверхструктурной зарядовой модуляции 2ϵ от x показана на рис. 7б. Пунктиром на рисунке показана наша оценка:

$$2\epsilon(x) = (4x/3) \cdot (2\pi/a) \text{ при } 0 \leq x \leq x_0, \quad (4)$$

$$2\epsilon(x) = (1/4) \cdot (2\pi/a) \text{ при } x_0 \leq x \leq 0.25. \quad (5)$$

Точками на рисунке указаны экспериментальные данные для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $(La, Nd)_{2-x}Sr_xCuO_4$ [12]. Видно качественное согласие экспериментальных значений с расчетом. При $x > 0.1875$ величина 2ϵ не меняется и равна $2\epsilon = G_4 = G/4 = 0.25$. Магнитная модуляция при этом составляет величину $\epsilon = 0.125$. Значение $x_0 = 0.1875$ является некоторой критической точкой на фазовой диаграмме $T(x)$.

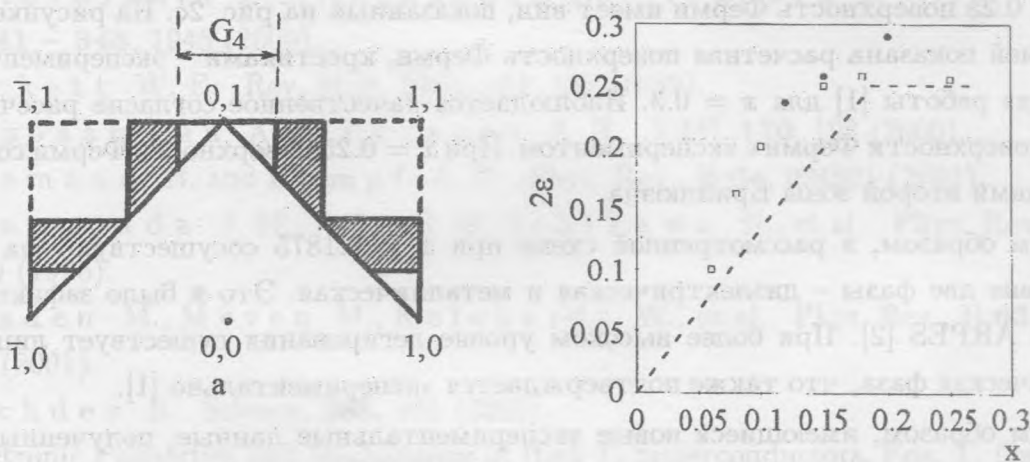


Рис. 7. Сверхструктурная модуляция 2ϵ и заполнение третьей зоны Бриллюэна дырочными носителями. а. Заполнение 3/4 состояний третьей зоны Бриллюэна дырочными носителями при уровне легирования $x = x_0 = 0.1875$. б. Зависимость параметра сверхструктурной зарядовой модуляции 2ϵ от уровня легирования x . Пунктирная линия – оценка по формулам (4) – (5), кружки и квадраты – экспериментальные данные для $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$ и $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, соответственно [12].

При $x \geq 0.1875$ дырочные носители возникают у потолка валентной зоны (ниже Пайерлсовской щели Δ^*), показанной на рис. 3д, в окрестности точки $(1/4, 1)$. Дальнейшее

увеличение легирования при $x > 0.1875$ приводит к уменьшению Пайерлсовской щели Δ^* из-за увеличения экранирования дырочными носителями, а также к уменьшению интенсивности нейтронографических линий, соответствующих сверхструктурному зарядовому и спиновому упорядочению. Кроме того, можно рассчитать изменение поверхности Ферми при уровне легирования $x > 0.1875$ по формуле (2), учитывая зависимость коэффициентов t' и t'' от x по формулам:

$$t' = t'_0 \cdot (0.25 - x)/0.25, \quad (6)$$

$$t'' = t''_0 \cdot (0.25 - x)/0.25, \quad (7)$$

где $t'_0 = -0.15$ эВ, $t''_0 = 0.1$ эВ – параметры для состояния с $x = 0.1875$, показанного на рис. 2b, 3c и 5b, когда исчезают диэлектрические прослойки между металлическими полосками при легировании. Максимальное значение x , соответствующее полному заполнению дырками третьей зоны Бриллюэна, равно 0.25 в расчете на один ион меди. При $x \geq 0.25$ поверхность Ферми имеет вид, показанный на рис. 2c. На рисунке сплошной линией показана расчетная поверхность Ферми, крестиками – экспериментальные данные из работы [1] для $x = 0.3$. Наблюдается качественное согласие рассчитанной формы поверхности Ферми с экспериментом. При $x = 0.25$ поверхность Ферми совпадает с границами второй зоны Бриллюэна.

Таким образом, в рассмотренной схеме при $x < 0.1875$ сосуществуют на локальном уровне две фазы – диэлектрическая и металлическая. Это и было зафиксировано методом ARPES [2]. При более высоком уровне легирования существует лишь одна, металлическая фаза, что также подтверждается экспериментально [1].

Таким образом, имеющиеся новые экспериментальные данные, полученные на качественных монокристаллах, можно объяснить в рамках модели кислородного сверхструктурного упорядочения с учетом антиферромагнитного упорядочения ионов меди. В частности, возникающие в настоящей модели металлические полоски шириной $4a$ с диэлектрическими прослойками между ними хорошо согласуются с широко обсуждаемыми в настоящее время моделями "страйпов".

В рамках модели находит естественное объяснение зависимость формы поверхности Ферми от уровня легирования для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и других ВТСП.

Возникающая в модели диэлектрическая Пайерлсовская щель Δ^* отождествляется с наблюдаемой псевдощелью.

[21] Lee Y. S., Brigneau R. J., Kastner M. A., et al. Phys. Rev., B 60, 3643 (1999).

[22] Tranquada J. M. Physica, B 241 – 243, 745 (1997).

Поступила в редакцию 23 августа 2002 г.

[1] Lee A., Kim C., Mizokawa T. et al. J. Phys. Soc. Japan, 68, 1490 (1999).

[2] Lee A., Kim C., Nakamura M. et al. Phys. Rev. B 63, 4137 (2000).

[3] Platzerovins L. and Hasden M. Phys. Rev. B 60, R15039 (1999).

[4] McQueeney R. J., Poirier Y., Egami T. et al. Phys. Rev. Lett. 83, 678 (1999).

[5] Poirier Y., Egami T., McQueeney R. J. et al. Cond-mat/0007114 (2000).

[6] McQueeney R. J., Egami T., Ohnuki H. et al. Cond-mat/0105292 (2001).

[7] Ichikawa N., Uchida S., Tranquada J. M. et al. Phys. Rev. Lett. 84, 1787 (2000).

[8] Golovashkin A. I., Ansharov N. V., Lyudskov L. L. et al. Physica C 341 – 348, 1941 (2000).

[9] Pickett W. E. Rev. Mod. Phys. 61, 433 (1989).

[10] Лозовский А. Н., Пыскаев А. П. УФН 170, 192 (2000).

[11] Norman B. and Kampf A. R. Phys. Rev. B 64, 024521 (2001).

[12] Tranquada J. M., Axe J. D., Ichikawa N. et al. Phys. Rev. B 64, 140401 (2001).

[13] Hasden M., Neeb M., Reichardt W. et al. Phys. Rev. B 63, 140510 (2001).

[14] Sachdev S. Science 285, 413 (2000).

[15] Electronic Properties and Mechanism of B₂V Superconductor. Eds. T. Okauchi, K. Ado, and T. Sasa. (Asvener, Amsterdam, 1992).

[16] Pischke H. M. Phys. Rev. B 62, 1504 (1998).

[17] Zubkov O. P., Zvezdovskiy G. A., Eder R. and Eder H. Phys. Rev. B 58, 1259 (1997).

[18] Zubkov O. P. and Eder H. J. Phys. Condens. Matter 13, 143 (2000).

[19] Eder H., Eder R., K. K. K. et al. Phys. Rev. B 57, 616 (1997).

[20] Zubkov O. P., Eder H., Eder R. et al. Phys. Rev. Lett. 84, 1787 (2000).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект N 01-02-16395) и Научного совета ГНТП "Актуальные направления в физике конденсированных сред" (подпрограмма "Сверхпроводимость").

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Ino A., Kim C., Mizokawa T., et al. J. Phys. Soc. Japan, **68**, 1496 (1999).
- [2] Ino A., Kim C., Nakamura M., et al. Phys. Rev., B **62**, 4137 (2000).
- [3] Pintschovius L. and Braden M. Phys. Rev., B **60**, R15039 (1999).
- [4] McQueeney R. J., Petrov Y., Egami T., et al. Phys. Rev. Lett., **82**, 628 (1999).
- [5] Petrov Y., Egami T., McQueeney R. J., et al. Cond-mat/0003414 (2000).
- [6] McQueeney R. J., Egami T., Chung J.-H., et al. Cond-mat/0105593 (2001).
- [7] Ichikawa N., Uchida S., Tranquada J. M., et al. Phys. Rev. Lett., **85**, 1738 (2000).
- [8] Golovashkin A. I., Anshukova N. V., Ivanova L. I., et al. Physica, C **341** – **348**, 1945 (2000).
- [9] Pickett W. E. Rev. Mod. Phys., **61**, 433 (1989).
- [10] Головашкин А. И., Русаков А. П. УФН, **170**, 192 (2000).
- [11] Norman D. B. and Kampf A. P. Phys. Rev., B **64**, 024521 (2001).
- [12] Tranquada J. M., Axe J. D., Ichikawa N., et al. Phys. Rev., B **54**, 7489 (1996).
- [13] Braden M., Meven M., Reichardt W., et al. Phys. Rev., B **63**, 140510 (R) (2001).
- [14] Sachdev S. Science, **288**, 475 (2000).
- [15] Electronic Properties and Mechanisms of High T_c Superconductors. Eds. T. Oguchi, K. Kadowaki, and T. Sasaki (Elsevier, Amsterdam, 1992).
- [16] Liechtenstein A. I., Gunnarsson O., Andersen O. K., and Martin R. M. Phys. Rev., B **54**, 12505 (1996).
- [17] Sushkov O. P., Sawatzky G. A., Eder R., and Eskes H. Phys. Rev., B **56**, 11769 (1997).
- [18] Mishonov T. and Penev E. J. J. Phys.: Condens. Matter, **12**, 143 (2000).
- [19] Yamada K., Lee C. H., Kurahashi K., et al. Phys. Rev., B **57**, 6165 (1998).
- [20] Ichikawa N., Uchida S., Tranquada J. M., et al. Phys. Rev. Lett., **85**, 1738 (2000).