

ОСОБЕННОСТЬ ВЗАИМОСВЯЗИ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ВТСП-КУПРАТОВ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ БЛИЖНИМ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫМ ПОРЯДКОМ

С. Г. Овчинников^{a,b,*}, М. М. Коршунов^{a,c}, Л. П. Козеева^d, А. Н. Лавров^d

^a Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

^b Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

^c Department of Physics, University of Florida, Gainesville, Florida 32611, USA

^d Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 22 декабря 2009 г.

Приводятся результаты измерений анизотропного электросопротивления монокристаллов высокотемпературных сверхпроводников $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($R = \text{Tm}, \text{Lu}$) в широком интервале уровней допирования, свидетельствующие о нетривиальном влиянии магнитного порядка на электронные свойства купратов. В частности, полученные данные наглядно демонстрируют кроссовер от состояния с умеренной анизотропией электросопротивления $\rho_c/\rho_{ab} \sim 30$ к сильноанизотропному состоянию с $\rho_c/\rho_{ab} \sim 7 \cdot 10^3$ как по мере понижения температуры, так и по мере уменьшения концентрации дырок в плоскостях CuO_2 . Показано также, что величина анизотропии чувствительна к магнитному состоянию плоскостей CuO_2 и достигает максимума при установлении дальнего антиферромагнитного порядка. Результаты обсуждаются в рамках теории, основанной на $t-t'-t''-J^*$ -модели слоев CuO_2 с учетом сильных электронных корреляций и ближнего магнитного порядка. В этой теории демонстрируются аномалии спиновых корреляторов и топологии поверхности Ферми при критической концентрации дырок $p^* \approx 0.24$. Концентрационная зависимость энергии носителей тока показывает при $p < p^*$ частичное подавление энергии, обусловленное появлением псевдощели. Данная теория объясняет как экспериментально обнаруженную чувствительность анизотропии проводимости к установлению антиферромагнитного порядка, так и отсутствие аномалий в температурной зависимости сопротивления $\rho_{ab}(T)$ в окрестности температуры Нееля.

1. ВВЕДЕНИЕ

Взаимосвязь изменений электрических и магнитных свойств достаточно часто встречается в соединениях переходных металлов. Наиболее яркий пример дают переходы металл–диэлектрик с образованием волн спиновой плотности, например, NiS или V_2O_3 [1]. Поэтому экспериментальное обнаружение отсутствия изменений в сопротивлении $\rho_{ab}(T)$ слабодопированных несверхпроводящих купратов [2–4] при переходе через точку Нееля T_N иногда интерпретируется как отсутствие сильной связи носителей с магнитной подсистемой. В настоящей работе

приводится альтернативная интерпретация, в которой связь носителей со спиновой системой существует и сильна, а отсутствие изменений ρ_{ab} в окрестности T_N объясняется спецификой магнитного состояния квазидвумерных антиферромагнетиков. Также приводятся новые экспериментальные данные об анизотропных транспортных свойствах монокристаллов $R\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($R = \text{Tm}, \text{Lu}$), свидетельствующие о влиянии магнитной структуры на электронные свойства как в области существования дальнего антиферромагнитного (АФМ) порядка, так и при $T > T_N$. План работы следующий: в разд. 2 обсуждаются качественно взаимосвязь электронной и магнитной структур и особенности квазидвумерно-

*E-mail: sgo@iph.krasn.ru

го антиферромагнетизма в купратах. В разд. 3 приводятся экспериментальные данные по внутриплоскостной и межплоскостной проводимости монокристаллов $\text{R}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($\text{R} = \text{Tm}, \text{Lu}$) в широком интервале концентраций дырок. В разд. 4 анализируются электронные свойства с учетом ближнего магнитного порядка и псевдощели и делается качественное сопоставление с экспериментом.

2. СПЕЦИФИКА МАГНЕТИЗМА В КВАЗИДВУМЕРНЫХ КУПРАТАХ

Известно, что металл с поверхностью Ферми, удовлетворяющей условию нестинга, неустойчив относительно перехода в состояние волны зарядовой или спиновой плотности. В частном случае антиферромагнитной волны спиновой плотности ниже точки Нееля формируется диэлектрическое состояние [5, 6]. В модели Хаббарда, которая часто применяется для описания электронной структуры соединений переходных металлов, подобный зонный механизм перехода металл–диэлектрик имеет место в пределе слабых корреляций $U \ll W$, где U — параметр Хаббарда, W — полуширина зоны. В обратном пределе сильных корреляций $U \gg W$ взаимосвязь электронных и магнитных свойств становится еще сильнее. Даже в отсутствие носителей тока в недопированном диэлектрике Мотта–Хаббарда обменное взаимодействие между соседними спинами J_{ij} формируется виртуальными перескоками электронов t_{ij} с узла i на узел j и обратно, $J = 2t^2/U$. Допированные электроны (или дырки), перепрыгивающие с узла на узел на фоне антиферромагнитной структуры, имеют амплитуду перескока, зависящую от спиновых корреляторов $C_{ij} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ соседних спинов [7]. В этом и есть основной механизм взаимосвязи электронных и магнитных свойств в режиме сильных корреляций. Более строгий расчет электронной функции Грина показывает, что массовый оператор в модели Хаббарда определяется корреляционными функциями спиновых, зарядовых и парных флуктуаций [8, 9]. В результате при переходе из антиферромагнитной фазы в парамагнитную, когда спиновые корреляторы исчезают, ожидается изменение в электронной структуре либо в металлическое состояние (в режиме слабых корреляций) как в NiS, либо в парамагнитный диэлектрик Мотта–Хаббарда. Примером последней ситуации может служить LaTiO_3 , где диэлектрические свойства сохраняются и выше T_N , но в температурной зависимости $\rho(T)$ имеется излом в точке Нееля [10]. Тем

удивительнее выглядят плавная зависимость ρ_{ab} в купратах в окрестности точки Нееля [2–4] и отсутствие качественных изменений $\sigma_{ab}(T)$ при переходе от составов с парамагнитным состоянием к составам с дальним АФМ-порядком [2–4].

Чем отличается изменение магнитной структуры при переходе через точку Нееля в La_2CuO_4 , $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ и других недопированных купратах от NiS или LaTiO_3 ? В последних магнитная система трехмерна, а в купратах квазидвумерна. Если в трехмерном магнетике область сильных спиновых флуктуаций выше T_N узка, то в квазидвумерном антиферромагнетике поведение намного сложнее. В этих системах имеются два энергетических масштаба: сильный обмен в плоскости ($J \sim 0.1$ эВ) и слабый межплоскостной, $J' \sim (10^{-4}–10^{-5})J$ (либо анизотропия в плоскости такого же порядка, что эквивалентно с точки зрения формирования трехмерного дальнего антиферромагнитного порядка). Как известно, в двумерной системе в изотропной модели Гейзенберга температура Нееля была бы равна нулю в соответствии с теоремой Мермина–Вагнера. Анизотропия и межплоскостной обмен стабилизируют трехмерный антиферромагнитный порядок в La_2CuO_4 с температурой Нееля $T_N \sim J/\ln(J/J')$ [11]. Выше точки Нееля разрушается дальний порядок (корреляции между слоями CuO_2), а в плоскости CuO_2 большой обмен J сохраняет антиферромагнитные корреляции (ближний порядок) вплоть до температур $T \sim J \sim 1000$ К. При этом из нейтронографических измерений известно, что антиферромагнитная корреляционная длина ξ достаточно медленно убывает также и с ростом допирования, $\xi \propto x^{-1/2}$ [12]. Поскольку в широком интервале температур и допирования длина свободного пробега носителей l оказывается близка по величине или даже мала по сравнению с ξ , дырки большую часть времени движутся в антиферромагнитном окружении. Временные флуктуации ближнего порядка при низких температурах практически заморожены. Так, при $T \leq 10$ К характерное время жизни антиферромагнитного кластера размером ξ составляет 10^{-9} с, что намного больше характерных электронных времен, равных 10^{-13} с [13]. Поэтому основной вклад в формирование электронной структуры носителей в сильно коррелированной системе электронов слоя CuO_2 вносят квазистатические антиферромагнитные ближние корреляции. При переходе через точку Нееля изменения в электронной структуре невелики, поскольку в силу условия масштаба $l \ll \xi$ длядвигающихся дырок неважно, равна ли корреляционная длина бесконечности в случае

дальнего порядка, или равна 20 нм. Нельзя сказать, что изменения отсутствуют совсем: рассеяние дырок на пространственных и временных неоднородностях магнитной структуры приводит к анизотропному затуханию носителей, что обуславливает распыливание части дырочного кармана поверхности Ферми [9, 14, 15] и формирование конечных дуг Ферми, наблюдаемых в ARPES-экспериментах [16].

3. ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ

Одним из наиболее наглядных проявлений необычного электронного состояния в купратных ВТСП является контрастирующее поведение электронного транспорта вдоль плоскостей CuO_2 и между плоскостями, когда металлическая проводимость $\sigma_{ab}(T)$ может сочетаться с активационным поведением $\sigma_c(T)$ [2–4, 17, 18], а аномалии проводимости, связанные с антиферромагнитным упорядочением, проявляются лишь в межплоскостном направлении [2–4, 18]. Исчерпывающего объяснения такому поведению пока не найдено, что, в частности, связано с отсутствием систематических экспериментальных данных об анизотропии проводимости в зависимости от уровня допирования для большинства семейств ВТСП-купратов. В связи с этим, в данной работе проводятся подробные измерения анизотропного электросопротивления монокристаллов $\text{R}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($\text{R} = \text{Tm}, \text{Lu}$) в области составов от слабодопированного антиферромагнетика до оптимально допированного сверхпроводника. Методики выращивания монокристаллов, задания требуемого содержания кислорода и прецизионного измерения компонент сопротивления подробно описаны в предыдущих работах [2, 3]. Поскольку качественной разницы в поведении монокристаллов $\text{Tm}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ и $\text{Lu}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ не наблюдается, далее в тексте данные для них будут разделяться только в том случае, когда было принципиально, что вся серия измерений выполнена на одном и том же кристалле.

Характерные температурные зависимости анизотропного сопротивления для трех областей допирования приведены на рис. 1. Сразу обращает на себя внимание практически неизменное поведение компоненты сопротивления вдоль плоскостей CuO_2 : кривые $\rho_{ab}(T)$ подобны друг другу, хотя исследованная область допирований простирается от несверхпроводящего антиферромагнетика до оптимально допированного сверхпроводника. Единственное качествен-

ное изменение, не считая появления сверхпроводящего перехода, — это небольшое изменение кривизны зависимости $\rho_{ab}(T)$. Изменение абсолютных значений ρ_{ab} в нормальном состоянии оставляет всего 6–9 раз (в зависимости от температуры) при изменении содержания кислорода x от 0.32 до 0.91, соответствующем изменению концентрации дырок p в слое CuO_2 : в 4–5 раз от $p \approx 3.5\text{--}4\%$ до $p \approx 17\%$ [4, 19]. Следовательно, увеличение проводимости, нормированной на концентрацию дырок, при переходе от антиферромагнитных составов к оптимально допированному сверхпроводнику составляет всего 1.5–2 раза. А если вспомнить, что при содержании кислорода $x \approx 0.9$ дополнительная проводимость слоев из цепочек CuO_x становится сравнимой с проводимостью плоскостей CuO_2 , то увеличение подвижности носителей оказывается ограниченным сверху всего лишь несколькими десятками процентов, что близко к экспериментальной точности измерений электросопротивления и концентрации носителей. Таким образом, характер электронного транспорта вдоль плоскостей CuO_2 оказывается очень слабо зависящим от уровня допирования. Происходит лишь масштабирование концентрации носителей и внутриплоскостной проводимости, что подтверждает выводы [4] о слабой зависимости подвижности дырок в плоскостях CuO_2 от допирования.

Поведение межплоскостного электросопротивления $\rho_c(T)$ на рис. 1 оказывается намного сложнее. Характер зависимости $\rho_c(T)$ изменяется от квазиметаллического при максимальных уровнях допирования к сложному куполообразному виду в слабодопированных составах, который дополняется резким изломом кривой при переходе в состояние с дальним антиферромагнитным порядком ниже температуры Нееля T_N (отмечена стрелочкой на рис. 1) [2, 3]. Более необычно выглядит резкий рост ρ_c ниже температуры Нееля при полном отсутствии каких-либо особенностей на кривой $\rho_{ab}(T)$ [2–4]. Резкое увеличение ρ_c при переходе в АФМ-состояние однозначно указывает на существенную роль спинового порядка в межплоскостном электронном транспорте.

Наглядное представление об эволюции анизотропии электросопротивления можно получить из систематических данных ρ_c/ρ_{ab} , полученных на одной паре образцов, которые были отрезаны от одного монокристалла $\text{Tm}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ (рис. 2). Температурная зависимость ρ_c/ρ_{ab} выглядит заметно проще, чем поведение одной компоненты ρ_c . Как видно на рис. 2, анизотропия сопротивления плавно увеличивается примерно от 30 (см. также рис. 1в) до приблизительно 7000–8000 как при понижении

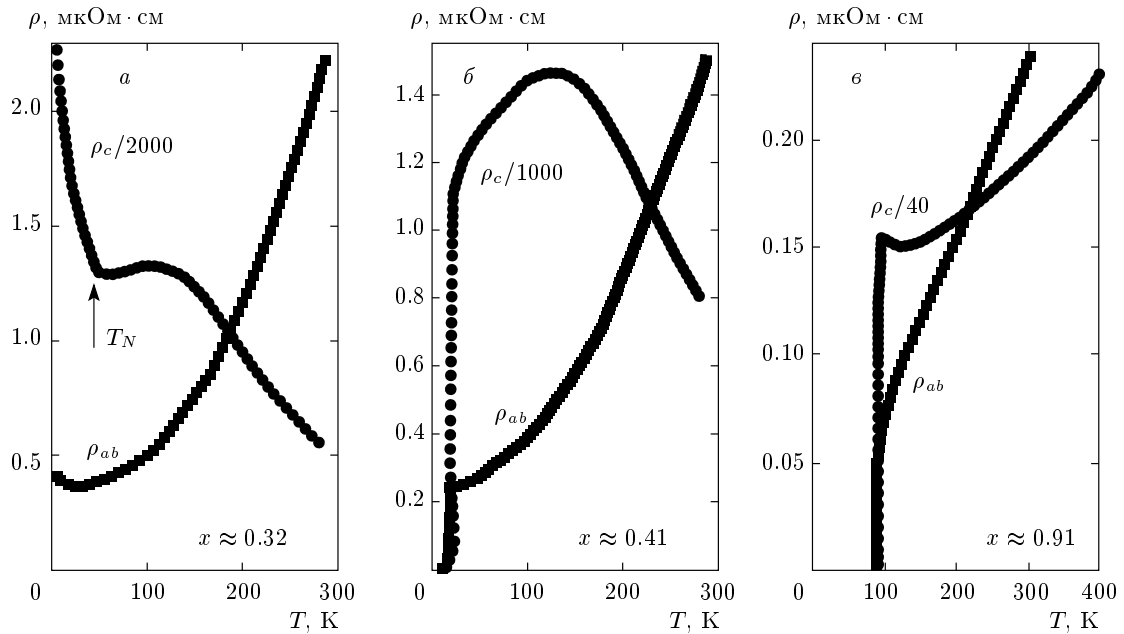


Рис. 1. Температурные зависимости анизотропного электросопротивления монокристаллов $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($\text{R} = \text{Lu}, \text{Tm}$) для различных областей допирования: для слабодопированного несверхпроводящего состава с $T_N \approx 43 \text{ K}$ (а), слабодопированного сверхпроводящего состава с $T_C \approx 19 \text{ K}$ (б) и приблизительно оптимально допированных кристаллов с $T_C \approx 90 \text{ K}$ (в)

температуры, так и при понижении уровня допирования при фиксированной температуре. При этом изменение анизотропии имеет вид кроссовера между двумя выделенными состояниями с умеренной и большой электронной анизотропией. Хотя на рис. 2 отсутствует область АФМ-составов, из рис. 1 легко понять, что при переходе в АФМ-состояние происходит дополнительный резкий рост анизотропии [3]. Абсолютное значение анизотропии ρ_c/ρ_{ab} при $T = 100 \text{ K}$ изменяется практически линейно с увеличением концентрации дырок (рис. 3) и насыщается в упомянутых областях с умеренной, около 30–50, и большой, около 10^4 , анизотропией.

Влияние спинового АФМ-упорядочения на анизотропию проводимости наглядно проявляется при переходе Нееля. Однако существенно более важным для понимания природы ВТСП является вопрос о влиянии спиновых корреляций на электронный транспорт в области сверхпроводящих составов. Действительно, динамические АФМ-корреляции сохраняются в чрезвычайно широкой области составов и температур [12] (рис. 4а) и могут быть ответственны не только за отчетливую аномалию $\rho_c(T)$ при T_N , но и за наблюдаемый плавный рост анизотропии сопротивления по мере снижения концентрации носителей и приближения к области АФМ-порядка. По-

пытаться ответить на этот вопрос можно было бы, смещая температуру Нееля и воздействуя на масштаб АФМ-корреляций. Возможность такого воздействия, хотя и слабого, для соединений $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ действительно имеется. Как было недавно показано [20], приложение сильного магнитного поля стабилизирует АФМ-корреляции и вызывает увеличение температуры Нееля. Хотя механизм такого воздействия пока не выяснен однозначно, одним из возможных объяснений является дополнительная анизотропия, вносимая в спиновую систему магнитным полем. Эта дополнительная анизотропия усиливает АФМ-корреляции и стабилизирует дальний порядок аналогично магнито-кристаллической анизотропии или межплоскостному спиновому взаимодействию J' . В купратах дальний АФМ-порядок устанавливается тогда, когда J' , проинтегрированное по объему корреляции $J' \sim \xi_{ab}^2$, сравнивается с $k_B T$. Дополнительная магнитная анизотропия, внесенная внешним магнитным полем, также интегрируется по объему АФМ-корреляции и конкурирует с температурным разупорядочением. Очевидно, что наибольшее воздействие внешнее магнитное поле должно оказывать вблизи T_N , где размер корреляций уже достаточно велик, а при повышении температуры или уровня допирования вли-

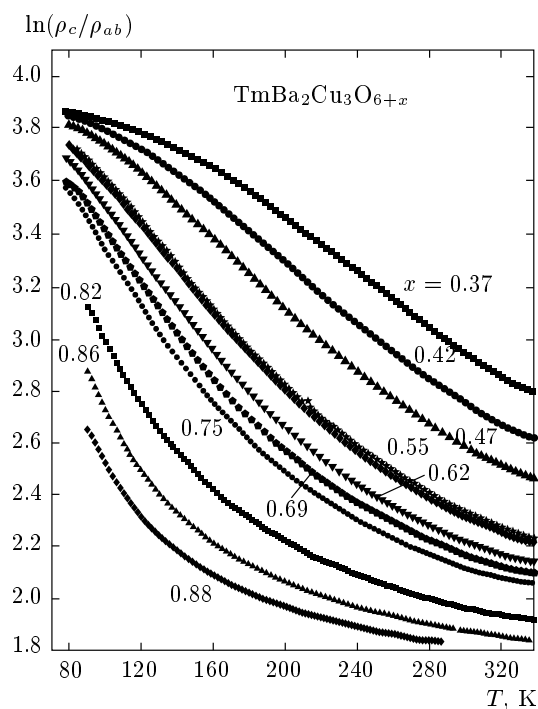


Рис. 2. Температурные зависимости анизотропии электросопротивления ρ_c/ρ_{ab} монокристаллов $\text{TmBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ при различном содержании кислорода. Все значения компонент сопротивления $\sigma_c(T)$ и $\sigma_{ab}(T)$ были получены на одной паре образцов, которые были отрезаны от одного кристалла и подвергались параллельному отжигам. Измерения проводились после релаксации кристаллов при комнатной температуре, приводящей к упорядочению кислорода в цепочных слоях CuO_x .

яние магнитного поля будет ослабевать примерно как $[\xi_{ab}(T, p)]^2/k_B T$. Усиление АФМ-корреляций, вызванное приложенным магнитным полем, в свою очередь, может влиять на межплоскостной транспорт, что можно наблюдать, измеряя магнитосопротивление. Такие измерения, выполненные в работах [20, 21], показали, что магнитное поле действительно вызывает значительное положительное магнитосопротивление $\Delta\rho_c$, и, соответственно, увеличение анизотропии ρ_c/ρ_{ab} , причем область температур, в которой это наблюдается, не ограничена областью дальнего АФМ-порядка, а простирается вплоть до высоких температур (рис. 4б). Убедиться в спиновой природе наблюдаемого магнитосопротивления достаточно просто, слегка изменив концентрацию дырок и, соответственно, сместив температуру Нееля. Как видно на рис. 4, при смещении T_N происходит параллельное смещение всей кривой магнитосопротивления, что подтверждает связь маг-

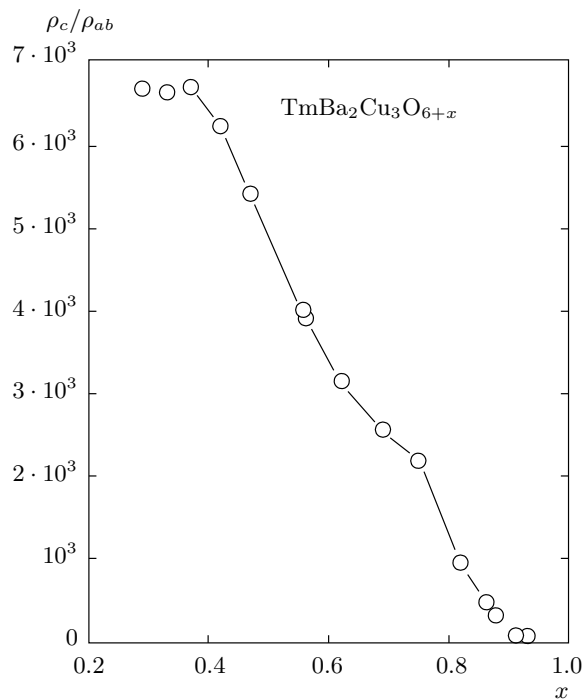


Рис. 3. Зависимость анизотропии электросопротивления ρ_c/r_{ab} монокристаллов $\text{TmBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ при $T = 100$ К от содержания кислорода

нитосопротивления во всей исследованной области температур с АФМ-упорядочением. Таким образом, АФМ-корреляции действительно оказывают воздействие на межплоскостной транспорт и анизотропию сопротивления не только в области АФМ-порядка, но и в широкой области температур и составов, где сохраняются сильные АФМ-корреляции.

4. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ

С учетом связи носителей и магнитных моментов электронная и магнитная структуры должны рассчитываться самосогласованно для каждой точки (x, T) фазовой диаграммы. Из-за сильных электронных корреляций в расчете необходимо учитывать запрет на заполнение двухчастичных состояний, для чего удобно использовать X -операторы Хаббарда: $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$. Здесь $|p\rangle$ и $\langle q|$ — локальные состояния $|\sigma\rangle$ с одной дыркой и спином $\sigma = \pm 1/2$, а также синглет Жанга–Райса $|S\rangle$. Запрет на двойное заполнение для дырочных купратов означает, что из локального базиса модели Хаббарда удалены двухэлектронные состояния $d^{10}p^6$ (вакуум дырок $|0\rangle$). Несмотря на сложность алгебры

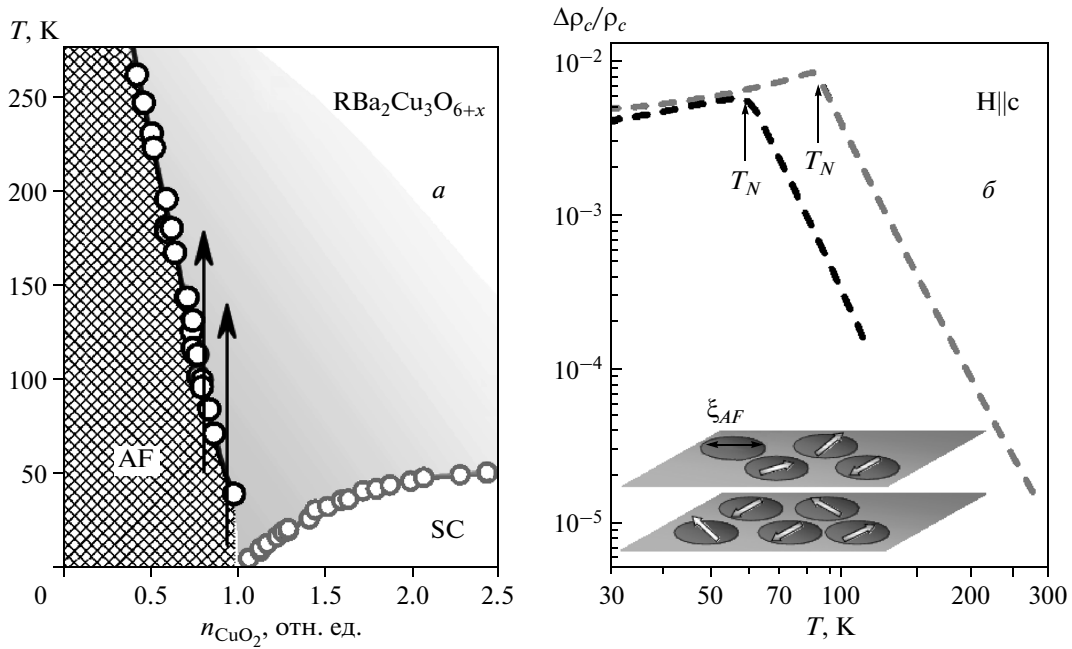


Рис. 4. а) Фазовая диаграмма соединений $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в области превращения антиферромагнетик–сверхпроводник [3] в зависимости от концентрации носителей n_{CuO_2} , относительные значения которой определены из данных по электропроводности вдоль плоскостей CuO_2 . За единицу взята пороговая концентрация носителей, при которой возникает сверхпроводимость. Затененная часть фазовой диаграммы выше T_N и T_C схематически иллюстрирует область сильных динамических АФМ-корреляций в плоскостях CuO_2 . Стрелками указаны состояния, для которых приведены данные по магнитосопротивлению на рис. б, где дана температурная зависимость межплоскостного магнитосопротивления $\Delta\rho_c/\rho_c$ монокристаллов $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ для магнитного поля $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$, взятая из работы [21]. На вставке иллюстрируется магнитное состояние $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в области выше T_N : двумерные антиферромагнитные корреляции имеют размер $\xi_{AF}(T)$ в плоскостях CuO_2 и флуктуирующее направление подрешеточной намагниченности (показано стрелками)

X -операторов по сравнению с обычными ферми- или бозе-операторами, их применение гарантирует точный учет двухчастичного запрета в любых приближениях, в отличие от метода слэив-бозонов. Из микроскопической многозонной p - d -модели, учитывающей все орбитали меди и кислорода и сильные кулоновские взаимодействия электронов, для описания низкоэнергетических возбуждений выводится t - t' - t'' - J^* -модель с перескоками t , t' и t'' на первые, вторые и третьи соседи и обменом J [22]. Звездочка означает, что мы учитываем трехцентровые коррелированные перескоки, амплитуда которых равна также J .

В настоящей работе неуместно выписывать функции Грина и массовый оператор дырок, определяемые спиновыми $C_{0n} = \langle S_0^+ S_n^- \rangle$ и кинетическими $K_{0n} = \langle X_0^{S\bar{S}} X_n^{\bar{S}S} \rangle$ корреляционными флуктуациями. Для нижней зоны Хаббарда, определяемой оператором $X^{0\sigma}$ и соответствующей

дну зоны проводимости, процедура и результаты вычислений приведены в работах [22, 23]. Для интересующей нас при дырочном допировании валентной зоны, которая в дырочном представлении есть верхняя хаббардовская зона и описывается оператором $X^{\bar{S}S}$, аналогичные расчеты приведены в работе [24]. Здесь, развивая работу [24], приведем новые результаты, необходимые для обсуждения экспериментальных данных.

Магнитная структура с ближним антиферромагнитным порядком описывается в приближении изотропной спиновой жидкости, в котором все компоненты спина имеют одинаковые корреляционные функции: $\langle S_0^x S_n^x \rangle = \langle S_0^y S_n^y \rangle = \langle S_0^z S_n^z \rangle = C_{0n}/2$. Эти функции находятся из спиновой функции Грина $\langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle$ методом, развитым в работах [22, 23, 25, 26]. Кинетические корреляторы K_{0n} и химический потенциал выражаются через дырочную функцию Грина $\langle\langle X_i^{\bar{S}S} | X_j^{S\bar{S}} \rangle\rangle$. Для каждого

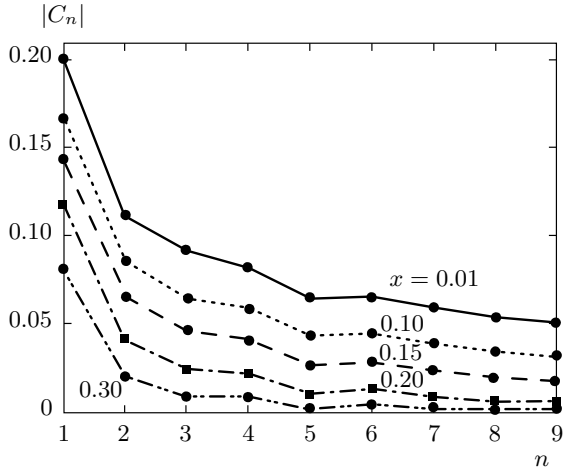


Рис. 5. Убывание спиновых корреляционных функций C_{0n} в зависимости от концентраций допированных дырок x и номера координационной сферы n . Для $n = 2, 3, 5, 7, 9$ корреляции положительны (внутри одной подрешетки), для $n = 1, 4, 6, 8$ — отрицательны (между разными подрешетками)

уровня допирования x с полной концентрацией дырок $n_h = 1 + x$ корреляторы и химический потенциал находятся самосогласованно, т.е. изменения электронной и магнитной структур в теории взаимосвязаны. На рис. 5 приведены модули спиновых корреляционных функций в зависимости от номера n -й координационной сферы до $n \leq 9$ для разных x . Следует отметить, что корреляции антиферромагнитны, т.е. C_{0n} отрицательно для чужой подрешетки ($n = 1, 4, 6, 8$) и положительно для своей подрешетки ($n = 2, 3, 5, 7, 9$). Видно, что в области слабого допирования спиновые корреляции убывают достаточно медленно. Для сильнодопированных составов с $x = 0.3$ имеют место корреляции только между ближайшими соседями, именно таким и ожидается поведение спинов в парамагнетике. Состав с $x = 0.20$, хотя и имеет уровень допирования больше оптимального, но показывает еще следы ближнего порядка. На концентрационной зависимости корреляторов C_{0n} видно, что есть критическая точка $x_c = 0.24$, в которой C_{01} имеет излом, а более далекие корреляторы практически обращаются в нуль при $x > x_c$. Точка x_c близка к критическому значению возникновения псевдощели $p^* = 0.24$.

Для выяснения роли критической точки x_c вычислялась концентрационная зависимость полной энергии $\langle H \rangle$ (рис. 6) и ее парциальных составляющих: кинетической энергии $\langle H_t \rangle$, потенциальной

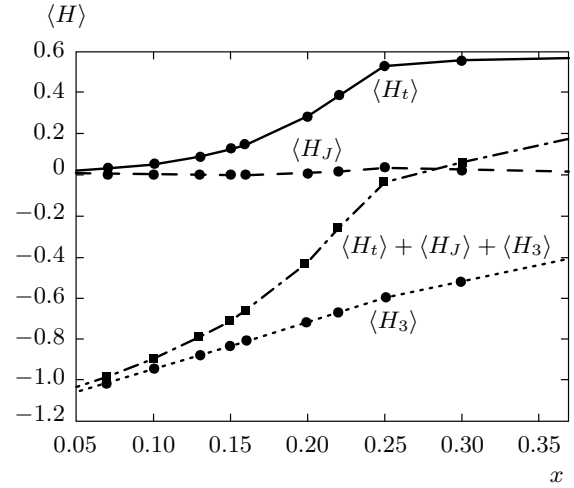


Рис. 6. Концентрационная зависимость кинетической, потенциальной и полной энергий в $t-t'-t''-J^*$ -модели в состоянии изотропной спиновой жидкости. Излом и частичное подавление кинетической энергии ниже $x_c = 0.24$ соответствуют зарождению псевдощелевого состояния

энергии $\langle H_J \rangle$ и добавки к энергии от трехцентровых коррелированных перескоков $\langle H_3 \rangle$. За начало отсчета энергии взято среднее значение одноузельной части гамильтониана

$$\langle H_0 \rangle = \sum_{i\sigma} (\varepsilon - \mu) \langle n_{i\sigma} \rangle.$$

Трехцентровые слагаемые важны для формирования сверхпроводящего состояния с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией, поскольку их амплитуда задается обменным параметром J [27]. Полученная нами малость их вклада в энергию согласуется с результатом точной диагонализации конечных одномерных и двумерных кластеров [28]. Потенциальная энергия $\langle H_J \rangle$ изменяется практически линейно с концентрацией дырок с небольшим изломом в критической точке x_c . Самое заметное проявление критической точки имеет место для кинетической энергии носителей. Выше x_c зависимость линейная, примерно как $(1 + x)$, что характерно для двумерного электронного газа со средней энергией $\bar{\varepsilon} \sim \varepsilon_F \sim n_h = 1 + x$. Продолжение этой зависимости левее критической точки показывает, что кинетическая энергия при $x < x_c$ меньше той, что ожидается для свободного электронного газа. Понижение энергии мы связываем с образованием псевдощели в окрестности уровня Ферми, в результате чего часть электронных состояний перестает вносить вклад в энергию. Таким образом, совпадение нашей критической точки x_c и точки p^* не случайно, эта точка соответствует зарождению при

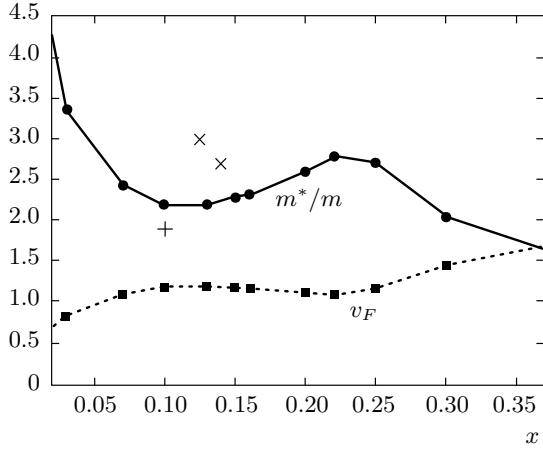


Рис. 7. Концентрационные зависимости эффективной массы m^*/m_0 и скорости на уровне Ферми v_F в нодальном направлении $[1, 1]$: + — экспериментальные значения эффективной массы по данным квантовых осцилляций для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ [30], × — для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ [31, 32]

$T = 0$ псевдощели ниже $x_c = p^*$. Концентрационная зависимость кинетической энергии описывается зависимостью

$$\frac{E_{kin}(p)}{E_{kin}(p^*)} = \exp\left\{-\frac{4E_g(p)}{J}\right\},$$

где псевдощель $E_g(p) = J(1 - p/p^*)$. Природа псевдощели в нашей теории связана с усилением ближнего антиферромагнитного порядка при уменьшении концентрации допирования, и близка спин-флуктуационной природе, рассматривавшейся в работах [15, 29].

Для анализа транспортных экспериментов важны такие характеристики носителей, как эффективная масса m^* и скорость на уровне Ферми v_F . Их концентрационные зависимости показаны на рис. 7. Отметим, что изменения всех величин, приведенных на рис. 7, в широком диапазоне концентраций от слабодопированных до сильнодопированных составов незначительны. Малые изменения фермиевской скорости обнаружены методами ARPES [33], а эффективной массы носителей — из анализа экспериментальных данных по транспортным и оптическим свойствам [4, 34]; наши расчеты качественно согласуются с выводами работ [4, 34].

Расчет электропроводности в сильно коррелированных системах с той же степенью детальности, как электронной структуры с эволюцией поверхности Ферми [24], в настоящее время отсутствует. Вместо этого приведем более грубую оценку качествен-

ного характера, основанную на понимании различного механизма транспорта вдоль и поперек плоскости CuO_2 . Перескок дырок в плоскости в силу условия $l \ll \xi$ происходит в основном внутри каждого АФМ-кластера. Такие перескоки когерентны в том смысле, что допированный АФМ есть металл с определенной поверхностью Ферми (даже если ее часть вследствие образования псевдощели не участвует в проводимости, то оставшиеся ферми-дуги определяют металлическую проводимость). В то же время перескоки вдоль оси c происходят всегда между различными АФМ-кластерами, т. е. некогерентно. Эту некогерентность мы учтем следующим образом. Обычно при вычислении электропроводности используется приближение времени релаксации для неравновесной части фермиевской функции распределения $g_k = f_k - f_k^0$ (где f_k и f_k^0 — соответственно неравновесная и равновесная функции):

$$-\frac{\partial f_k}{\partial t} = -\frac{\partial g_k}{\partial t} = \frac{g}{\tau}. \quad (1)$$

Мы воспользуемся формулой (1) и следующим из нее тензором электропроводности известного вида,

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2\tau}{4\pi^3\hbar} \iint v_{k_i} v_{k_j} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon \frac{dS}{|\mathbf{v}_k|}, \quad (2)$$

для транспорта в плоскости a, b . Здесь $\mathbf{v}_k = \nabla_k \varepsilon(k)/\hbar$, dS — элемент площади изоэнергетической поверхности (в случае двумерной плоскости — элемент дуги изоэнергетической линии). Некогерентность перескока вдоль оси c учтем тем, что обратное время релаксации будет активационным,

$$1/\tau_c = 1/\tau \exp\{-E_g/kT\}, \quad (3)$$

где $E_g(k, p) = E_g(p)\varphi_k$ — псевдощель, зависящая от волновых векторов в плоскости a, b и от допирования,

$$E_g(p) = J \left(1 - \frac{p}{p^*}\right), \quad (4)$$

$$\varphi_k = \frac{1}{2}(\cos k_x a - \cos k_y a).$$

Фактически выражение (3) есть наша гипотеза, основанная на различии механизмов перескока в плоскости a, b и направлении c . Что касается угловой зависимости вида $d_{x^2-y^2}$ (4), то она установлена экспериментально методами ARPES [35–38] и получена теоретически для слабодопированных АФМ-купратов в работе [39]. Амплитуда щели вида $E_g(p) = J(1 - p/p^*)$ была предложена для анализа температурной и концентрационной зависимостей электронной энтропии и теплоемкости [37], и

такая же концентрационная зависимость для кинетической энергии получена нами на рис. 6 для кинетической энергии.

При вычислении проводимости в формулу (2), как обычно, входит интегрирование по поверхности Ферми:

$$-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon_k - \mu). \quad (5)$$

В результате для отношения сопротивлений $y = \rho_c / \rho_{ab}$ получаем

$$y = \int k_x k_y \delta(\varepsilon_k - \mu) dk_x k_y \times \left[\int k_z^2 \exp \left\{ -\frac{E_g(p)}{2kT} (\cos k_x a - \cos k_y a) \times \delta(\varepsilon_k - \mu) dk_x k_y \right\} \right]^{-1}. \quad (6)$$

В области допирования $p \geq p_{opt}$, где $p_{opt} \approx 0.16$ — оптимальное допирование, поверхность Ферми большая. Для простой оценки аппроксимируем ее выражением

$$\cos k_x a + \cos k_y a = 0, \quad (7)$$

в результате анизотропия проводимости равна

$$y = \frac{\sigma_{ab}}{\sigma_{c0} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \exp \left(-\frac{E_g(p)}{kT} \cos x \right) dx} = \frac{y_0}{I_0(a)}. \quad (8)$$

Здесь σ_{c0} — проводимость вдоль оси c в отсутствие псевдощели при $p > p^*$, $I_0(a)$ — функция Бесселя мнимого аргумента, $y_0 = \sigma_{ab} / \pi \sigma_{c0}$, $a = E_g(p) / kT$. Отметим, что формула (8) ни в коей мере не может претендовать на теорию анизотропии сопротивления, она получена с рядом грубых упрощений и будет использована нами лишь для качественного сравнения с экспериментом.

Следует отметить, что приведенные упрощенные оценки анизотропии сопротивления не позволяют таким же образом описывать температурные зависимости ρ_{ab} и ρ_c по отдельности. Для этого необходимо явно учитывать рассеяние носителей на спиновых флуктуациях. Подобное рассмотрение проделано во многих работах ранее как в рамках феноменологического подхода почти антиферромагнитной ферми-жидкости [40–44], так и в рамках микроскопических подходов с учетом сильных электронных корреляций [45–48]. В результате удается описать линейную температурную зависимость сопротивления оптимально допированных купратов. При вычислении отношения сопротивлений ρ_c / ρ_{ab} подобные степенные поправки сокращаются и главную

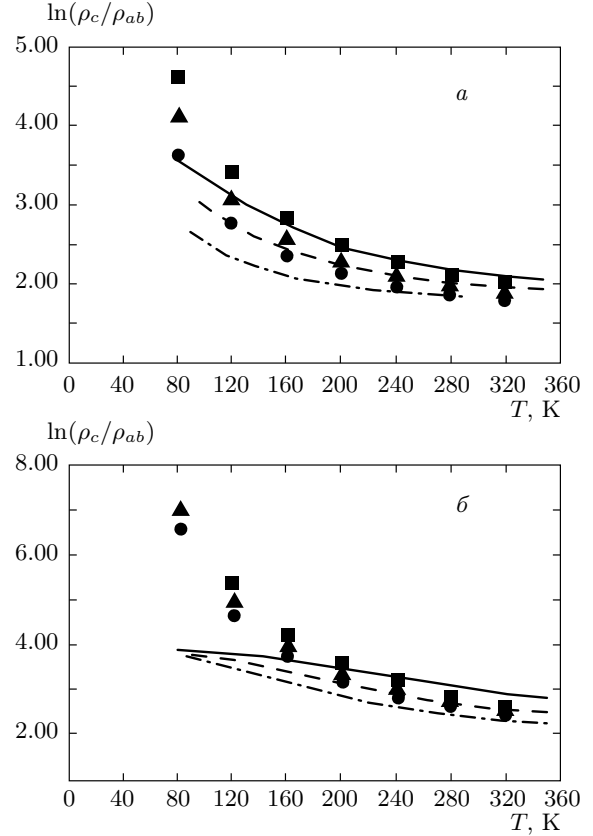


Рис. 8. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей анизотропии сопротивления для составов с допированием, близким к оптимальному (а), и с малым допированием (б): а — $p = 13$ (сплошная линия, ■), $p = 14.5$ (штриховая линия, ▲), $p = 16$ (штрихпунктир, ●); б — $p = 4.5$ (сплошная линия, ■), $p = 6$ (штриховая линия, ▲), $p = 7.5$ (штрихпунктир, ●)

роль в обсуждаемых нами эффектах играет экспоненциальная зависимость (3), т. е. проявление псевдощели.

При сравнении с экспериментом формула (8) содержит один эмпирический параметр y_0 . Параметры псевдощели вычислены из микроскопической теории [24] *ab initio*: $J \sim 1600$ К, $p^* = 0.24$. На рис. 8 приведена серия зависимостей $\ln y$ от температуры для разных значений концентрации допирования. Параметр $y_0 = 35$. При высоких температурах удалось описать всю серию экспериментальных кривых для разных концентраций. С уменьшением уровня допирования расхождения расчета и эксперимента увеличиваются, что мы связываем с грубостью описания поверхности Ферми. Действительно, уравне-

ние (7) не описывает малых карманов и дуг, известных для слабодопированных составов. Сравнение концентрационной зависимости ρ_{ab} с данными ARPES [38] показывает, что изменение сопротивления при уменьшении p хорошо согласуется с уменьшением длины сохранившихся ферми-дуг в окрестности диагоналей $(0,0)$ – (π,π) и уменьшением спектрального веса вблизи этих точек. Таким образом, проводимость вдоль слоев CuO_2 связана с длиной дуги L .

При уменьшении температуры расхождение между расчетом по формуле (8) и экспериментом увеличивается по той же причине, что и с уменьшением допирования: растут АФМ-корреляции, что меняет зонную структуру и поверхность Ферми. Анализ более общей формулы (6) при $T \rightarrow 0$ показывает ограниченность отношения ρ_c/ρ_{ab} . Действительно, экспоненциальный фактор при $T \rightarrow 0$ приводит к тому, что вклад в интеграл будут давать только те области k -пространства, где $\varphi_k = 0$. Это нодальные направления $k_x = \pm k_y$. Это обрезание интеграла за счет псевдощели и дает ограниченность ρ_c/ρ_{ab} при $T \rightarrow 0$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теория электронной структуры с учетом ближнего магнитного порядка позволила качественно объяснить важный экспериментальный вывод об отсутствии излома в кривых $\rho_{ab}(T)$ при пересечении T_N . Что касается описания температурной и концентрационной зависимостей проводимости и их анизотропии в режиме ближнего магнитного порядка и порожденной флуктуациями этого порядка псевдощелью, то качественный анализ эксперимента показывает следующую роль псевдощели в процессах проводимости. Для сильнодопированных составов с большой поверхностью Ферми все состояния участвуют в транспорте и анизотропия проводимости весьма невелика, около 30. По мере снижения концентрации носителей и открытия псевдощели вблизи точек $(\pi,0)$ и $(0,\pi)$, внутриплоскостная проводимость уменьшается почти линейно с увеличением площади поверхности Ферми, охваченной псевдощелью. При этом характер проводимости не меняется, потому что участки поверхности Ферми под псевдощелью просто выпадают из проводимости. Для проводимости вдоль оси с псевдощелью на участке максимальной дисперсии сразу вызывает изменение характера проводимости на активационный, частично шунтированный

сохранившимися участками поверхности Ферми без псевдощели. Температурная зависимость анизотропии проводимости будет иметь, соответственно, близкий к активационному характер при высоких температурах. По мере понижения температуры и экспоненциального убывания активационного вклада в межплоскостную проводимость роль шунтирующих участков будет возрастать и анизотропия будет насыщаться со значениями около 10^4 , где проводимость во всех направлениях определяется областью ферми-дуг. При такой картине можно ожидать роста анизотропии примерно от 30 до 10^4 как при понижении температуры, так и при уменьшении уровня допирования при фиксированной температуре, что и наблюдается экспериментально. Сравнение теоретической оценки (8) с экспериментом показывает, что с помощью всего лишь одного параметра y_0 удалось описать целое семейство кривых ρ_c/ρ_{ab} для разных концентраций при высоких температурах. Мы не стали проводить более сложных расчетов по формуле (6) с поверхностью Ферми, зависящей от уровня допирования, поскольку считаем, что наше рассмотрение анизотропии носит грубый качественный характер, не позволяющий претендовать на количественную теорию.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 09-02-01224, 09-02-00127) и в рамках программы Президиума РАН «Квантовая физика конденсированных сред» (проект 5.7).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ф. Мотт, *Переходы металл-изолятор*, Наука, Москва (1979).
2. A. N. Lavrov and L. P. Kozeeva, *Physica C* **248**, 365 (1995); А. Н. Лавров, Л. П. Козеева, *Неорган. материалы* **34**, 1003 (1998).
3. A. N. Lavrov, M. Yu. Kameneva, and L. P. Kozeeva, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5636 (1998).
4. Y. Ando, A. N. Lavrov, S. Komiyama, K. Segawa, and X. F. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017001 (2001).
5. Н. А. Козлов, Л. А. Максимов, *ЖЭТФ* **48**, 1184 (1965).
6. Ю. В. Копаев, *Труды ФИАН* **86**, 3 (1975).
7. Д. И. Хомский, *ФММ* **29**, 31 (1970).
8. Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников, *ТМФ* **31**, 379 (1977).

9. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *ЖЭТФ* **131**, 259 (2007).
10. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
11. С. Г. Овчинников, О. Г. Петраковский, *ФТТ* **29**, 1866 (1987).
12. M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. Endoh, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 897 (1998).
13. S. M. Haden et al., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 821 (1991).
14. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, Зю Хайн, *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
15. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, Письма в *ЖЭТФ* **82**, 217 (2005).
16. A. Damascelli, Z. Hussein, and Z. X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
17. T. Ito, H. Takagi, S. Ishibashi, T. Ido, and S. Uchida, *Nature* **350**, 596 (1991).
18. S. Komiya, Y. Ando, X. F. Sun, and A. N. Lavrov, *Phys. Rev. B* **65**, 214535 (2002).
19. K. Segawa and Y. Ando, *Phys. Rev. B* **69**, 104521 (2004).
20. A. N. Lavrov, L. P. Kozeeva, M. R. Trunin, and V. N. Zverev, *Phys. Rev. B* **79**, 214523 (2009).
21. A. N. Lavrov, Y. Ando, K. Segawa, and J. Takeya, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1419 (1999).
22. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, *Eur. Phys. J. B* **57**, 271 (2007).
23. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
24. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **136**, 898 (2009).
25. H. Shimara and S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2394 (1991); 989 (1992).
26. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, *ЖЭТФ* **106**, 1156 (1994).
27. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в *ЖЭТФ* **75**, 450 (2002).
28. K. J. von Szczepanski P. Horsch, W. Stephan, and M. Ziegler, *Phys. Rev. B* **41**, 2017 (1990).
29. М. В. Садовский, *УФН* **171**, 539 (2001).
30. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., *Nature* **447**, 565 (2007).
31. E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047003 (2008).
32. A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carrington et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047004 (2008).
33. X. J. Zhou, T. Yoshida, A. Lanzara et al., *Nature* **423**, 398 (2003).
34. W. J. Padilla, Y. S. Lee, M. Dumm et al., *Phys. Rev. B* **72**, 060511R (2005).
35. A. G. Loeser, Z. X. Shen, D. S. Dessau et al., *Science* **273**, 325 (1996).
36. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., *Nature* **382**, 51 (1996).
37. J. W. Loram, J. Luo, J. R. Cooper et al., *Phys. Chem. Sol.* **62**, 59 (2001).
38. T. Yoshida, X. J. Zhou, H. Yagi et al., *Physica B* **351**, 250 (2004).
39. V. Gavrichkov, A. Borisov, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **64**, 235124 (2001).
40. R. Hlubina and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **51**, 9253 (1995).
41. B. P. Stojkovic and D. Pines, *Phys. Rev. B* **55**, 8576 (1997).
42. L. B. Ioffe and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **58**, 11631 (1998).
43. A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko, and H. D. Drew, *Phys. Rev. B* **59**, 207 (1999).
44. A. Perali, M. Sindel, and G. Kotliar, *Eur. Phys. J. B* **24**, 87 (2001).
45. N. M. Plakida, *Z. Phys. B* **103**, 383 (1997).
46. G. Jackeli and N. M. Plakida, *Phys. Rev. B* **60**, 5266 (1999).
47. А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, *ЖЭТФ* **129**, 493 (2006).
48. А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Письма в *ЖЭТФ* **86**, 374 (2007).