

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И ДИЭЛЕКТРИЗАЦИЯ В ОКСИДНЫХ СЛОЯХ

А.А.Абрикосов, Л.А.Фальковский

Предлагается модель электронного спектра квазидвумерных веществ с носителями кислородного происхождения.

Одним из наиболее острых противоречий в современных представлениях о природе высокотемпературных сверхпроводников является то, что и La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ согласно зонным расчетам ^{1,2} должны быть металлами, а на эксперименте они демонстрируют диэлектрические свойства ³. Это же противоречие проявляется и в модели p - d -гибридизации, иллюстрирующей зонные расчеты: ширина зоны проводимости, ответственной за кинетические свойства, имеет тот же порядок величины, что и зона, в которой находятся локализованные (как это показывают нейтронные эксперименты) спины атомов меди.

Можно освободиться от упомянутых трудностей, если предположить, что зона носителей заряда возникает благодаря непосредственному перекрытию орбиталей кислорода. Электронные состояния на меди, тогда следует считать локализованными, и роль атомов меди, в основном, сводится к созданию потенциала, обладающего нужной трансляционной симметрией решетки. Такой подход поясняет рис. 1, на котором кислородные орбитали p_x , изображены направленными в сторону соседних кислородных (а не медных, как обычно) атомов; ортогональные p_y -орбитали на рисунке не показаны.

В приближении ближайших соседей для плоской решетки получим две зоны

$$\xi_{x'} = \xi_0 \cos \frac{k_x + k_y}{2} a - \xi_1 \cos \frac{k_y - k_x}{2} a, \quad \xi_{y'} = \xi_0 \cos \frac{k_y - k_x}{2} a - \xi_1 \cos \frac{k_x + k_y}{2} a, \quad (1)$$

где

$$\xi_0 = 2 \langle p_{x'}(0,0) | V_0 | p_{x'}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \rangle, \quad \xi_1 = -2 \langle p_{x'}(0,0) | V_0 | p_{x'}(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \rangle,$$

в скобках указаны координаты кислородных атомов в тетрагональных осях x, y в единицах расстояния a между атомами меди.

Зона Бриллюэна для спектра (1) – это ЗБ кислородной решетки с векторами $\mathbf{b}_\delta^{(1)} = \frac{2\pi}{a}(1,1)$, $\mathbf{b}_\delta^{(2)} = \frac{2\pi}{a}(1,1)$ показана на рис. 2 пунктиром; сплошные кривые – изознергетическая поверхность, отвечающая уравнению $\xi_{x'} = \xi_{y'} = 0$; заштрихованы области отрицательных энергий в каждой зоне.

Потенциал медных атомов V_{Cu} обладает периодом, большим, чем период кислородной решетки, и он определяет истинную ЗБ – она изображена сплошным квадратом со сторонами $\mathbf{b}_{\text{Cu}}^{(1)} = \frac{2\pi}{a}(1,0)$, $\mathbf{b}_{\text{Cu}}^{(2)} = \frac{2\pi}{a}(0,1)$. Учитывая V_{Cu} , мы должны перенести спектр (1) в пределы истинной ЗБ с помощью векторов \mathbf{b}_{Cu} . Из рисунка видно, что вся зона оказывается заполненной дважды – происходит нестинг, обеспечиваемый условиями $\xi_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{b}_{\text{Cu}}) = -\xi_\alpha(\mathbf{k})$.

Пока мы проследили за состояниями двух p -электронов (или двух дырок в p -оболочке). Всего имеется четыре таких электрона в структурной единице CuO_2 плоской решетки, и именно они полностью дважды заполняют ЗБ. Два электрона, находящихся на атомных p_z -орбиталях, участвуют во взаимодействии слоев. Что же касается электронной конфигурации меди, то рассматриваемой модели соответствует картина, в которой один из $3d$ -электронов, покидая d -оболочку, создает там локализованный момент и вместе с тем участвует в образовании заполненного $4s^2$ -состояния.

Простое перенесение спектра в пределы истинной ЗБ приводит к бесщелевому состоянию — энергетические зоны пересекаются по сплошным кривым рис. 2. Это вырождение, в принципе, может быть снято потенциалом V_{Cu} , спин-орбитальным взаимодействием в атоме кислорода λ , гибридизацией с состояниями меди, антиферромагнитным упорядочением спинов меди.

При учете V_{Cu} спектр (1) принимает вид

$$\epsilon = \pm \frac{\xi_x' - \xi_y'}{2} \pm \left[\left(\frac{\xi_x' + \xi_y'}{2} \right)^2 + u^2 \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где $u = \langle p_x(0,0) | V_{Cu} | p_y(0,0) \rangle$ — внутрицентровый интеграл перекрытия. Взаимодействие ближайших соседей приводит к зависимости u от квазимпульса, но не меняет структуру спектра. Из (2) видно, что пересечение зон сохраняется. Оно происходит теперь на кривых,

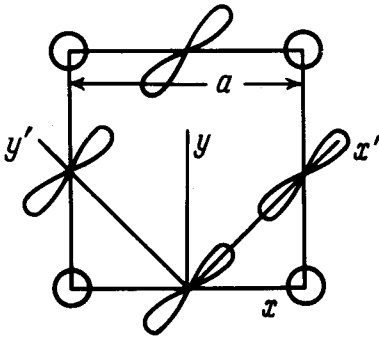


Рис. 1

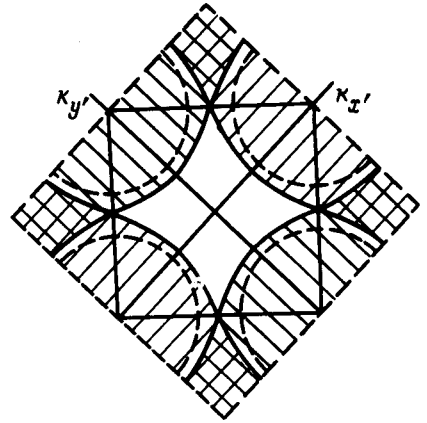


Рис. 2

определяемых уравнением $\xi_x, \xi_y = -u^2$ и изображенных пунктиром на рис. 2. Спин-орбитальное взаимодействие λ существенно вблизи тех же кривых, и в их окрестности для двух пересекающихся зон находим

$$\epsilon = \pm \left[\frac{(\xi_x, \xi_y + u^2 - \lambda^2)^2 + 4u^2\lambda^2}{\xi_x^2 + \xi_y^2 + 2u^2 - 2\lambda^2} \right]^{1/2}.$$

Теперь пересечение снялось: на самих кривых, определяемых уравнением $\xi_x, \xi_y + u^2 - \lambda^2 = 0$ появилась щель $\Delta = 4\lambda u |\xi_x| / (\xi_x^2 + u^2)$ причем ξ_x меняется от значения u при пересечении рассматриваемых кривых с границами ЗБ до приблизительно u^2/ξ_0 при пересечении с осями k_x, k_y . Это означает, что щель принимает значение порядка 2λ в области с линейным размером u вблизи границ ЗБ и имеет величину $4\lambda u/\xi_0$ почти на всей рассматриваемой кривой. Приведем для оценок характерные значения используемых параметров:

$$\xi_0 = 3 \text{ эВ}, \quad \xi_1 \approx 1 \text{ эВ}, \quad u = 0,5 \text{ эВ}, \quad \lambda = 0,01 \text{ эВ}.$$

Ввиду малой величины спин-орбитального взаимодействия надо рассмотреть влияние гибридизации. В традиционных зонных расчетах принимается во внимание гибридизация с $d_{x^2-y^2}$ состояниями меди, поскольку предполагается, что именно они играют существенную роль в формировании всей зонной структуры. Вместе с тем известно, что s - и d -состояния в меди перекрываются по энергии, а состояния с большим моментом и той же энергией должны быть в большей степени локализованы. Тогда гибридизация с s -состояниями должна быть более существенна. Это обстоятельство развязывает спиновую и транс-

портную электронные подсистемы и делает предлагаемую здесь модель самосогласованной. Расчет показывает, что гибридизация зависит от квазиимпульса, и на осях k_x, k_y исчезает как $p-s$, так и $p-d$ -гибридизация. Введя обозначение $\gamma = \sqrt{\epsilon_p(0,0) |V_0| s(\frac{1}{2}, 0)}^2 / (\epsilon_p - \epsilon_s)$ запишем разложение

$$\epsilon = \pm (v_f^2 k_f^2 + v_l^2 k_l^2 + \Delta^2)^{1/2}.$$

справедливое в окрестности каждой из четырех точек экстремума, лежащих при пересечении кривых вырождения с осями k_x, k_y, k_f и k_l выбраны перпендикулярно и вдоль кривых, $v_f \sim \xi_0 a, v_l \sim \gamma a, \Delta \sim 4\lambda u / \xi_0$. В окрестности экстремума изоэнергетические кривые — эллипсы, в области $u > |\epsilon| > \lambda, \gamma$ — это дуги, идущие по обе стороны от пунктирной кривой на расстоянии $|\epsilon|/v_f$. Сместив начало в ЗБ, можно превратить эти дуги в замкнутые кривые так, что область, занятая, например, дырками будет представлять собой кольцо. При $|\epsilon| > u$ появляются дополнительные карманы вблизи границ ЗБ. Заметим, что форма изоэнергетической поверхности в рассматриваемом случае совпадает с той, которая получается в 2 , однако, заполнение состояний отличается радикально. Обратим также внимание на то, что полученный спектр обладает свойством зеркальности: при изменении знака ϵ форма изоэнергетической поверхности не меняется, но там, где были дырки, после такой замены появляются электроны. По этой причине не должно быть принципиальной разницы между электронными и дырочными сверхпроводниками рассматриваемого типа.

Несколько слов о кинетике в обсуждаемой модели. При малых значениях химпотенциала $|\epsilon_F| < T < \lambda u / \xi_0$ мы имеем полупроводник с узкой запрещенной зоной. Поскольку в области $\lambda u / \xi_0 \ll |\epsilon| \ll \gamma$ возникает двумерный, а при $\gamma \ll |\epsilon| \ll \xi_0$ одномерный линейный спектр, то число носителей в невырожденном случае растет сначала квадратично, а затем линейно с температурой. Этот вывод согласуется с поведением проводимости ряда иттриевых монокристаллов в направлении оси c ⁴, когда носители распространяются туннельным образом. Наблюдаемый линейный ход сопротивления в плоскости $a-b$ получается в рамках рассматриваемой модели для широкого интервала температур (как в вырожденном, так и невырожденном случае), если определяющим является поляризационный механизм рассеяния на акустических фононах.

Изоэнергетическая кривая, изображенная на рис. 2, гофрирована в меру отношения ξ_1 / ξ_0 и таким образом отличается от известного квадрата в модели $p-d$ -гибридизации⁵. Благодаря этому при антиферромагнитном переходе, когда оба новых вектора ЗБ в два раза короче, чем \mathbf{b}_0 , полного нестинга не происходит. Влияние перехода на электронный спектр носителей оказывается малым по параметру T_N / ξ_1 и, что самое главное, не приводит к сингулярным членам в полной электронной энергии.

Пользуемся случаем поблагодарить С.М. Стишова за дискуссии и информацию об экспериментальных результатах и Б.А. Волкова за замечания.

Литература

1. Mattheiss L.F., Hamann D.R. Sol. St. Comm., 1987, 63, 395.
2. Massida S., Yu J., Freeman A.J., Koelling D.D. Phys. Lett. A, 1987, 122, 203.
3. Fiseher H.E., Watson S.K., Cahill D.G. Comments Cond. Mat. Phys., 1988, 14, 65.
4. Макаренко И.Н., Никифоров Д.К., Быков А.Б. и др. Письма в ЖЭТФ, 1988, 47, 52.
5. Jorgensen J.D., Schuttler H.-B., Hinks D.G., Capone D.W., II, Zhang K., Brodsky M.B. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1024.