

Недостаточно допированный купратный антиферромагнетик как двумерный антиферромагнитный металл

Г.Г. Сергеева

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина*

E-mail: gsergeeva@kipt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 17 мая 2005 г.

Для квазидвумерных недостаточно допированных купратных ВТСП с одной CuO_2 плоскостью развивается подход к описанию псевдощелевого состояния как двумерного антиферромагнитного металла с нефермиевскими носителями заряда. Для дырки иона Cu^{3+} , окруженного четырьмя ионными комплексами $\text{Cu}_\uparrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$ (или $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$), проведено обобщение модели локальных замкнутых токов Вармы. Показано, что учет электрон-колебательных взаимодействий приводит к вибранным переходам из невырожденного состояния иона Cu^{3+} в дважды вырожденное Cu_\uparrow^{2+} (или $\text{Cu}_\downarrow^{2+}$) с расщеплением энергетической зоны для двух типов квазилокальных состояний «медь-кислородной» дырки (вихрей или антивихрей), каждый из которых движется по своей магнитной подрешетке. Переход вихревого тока с «молекулы» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ на комплекс $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$ с ионом меди из той же магнитной подрешетки создает динамический эффект перемещения иона Cu^{3+} на место иона $\text{Cu}_\downarrow^{2+}$ и перехода «молекулы» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ в комплекс $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$.

Для квазидвовимірних недостатньо допованих купратних ВТНП з однієї CuO_2 площиною розвинуто підхід до опису псевдощільного стану як двовимірного антиферромагнітного металу з неферміївськими носіями заряду. Для дірки іона Cu^{3+} , який оточено чотирма іонними комплексами $\text{Cu}_\uparrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$ (або $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$), проведено узагальнення моделі локальних замкнутих струмів Варми. Показано, що урахування електрон-коливальних взаємодій призводить до вібранных переходів з невиродженого стану іона Cu^{3+} до двічі виродженого Cu_\uparrow^{2+} (або $\text{Cu}_\downarrow^{2+}$) з розщепленням енергетичної зони для двох типів квазилокальних станів «мідь-кисневої» дірки (вихорів або антивихорів), кожний з яких рухається за своєю магнітною підґраткою. Перехід вихорового струму з «молекули» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ на комплекс $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$ з іоном міді з тієї ж магнітної підґратки створює динамічний ефект переміщення іона Cu^{3+} на місце іона $\text{Cu}_\downarrow^{2+}$ та переходу «молекули» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ у комплекс $\text{Cu}_\downarrow^{2+}\text{O}_4^{2-}$.

PACS: 74.72.Bk

К настоящему времени для недостаточно допированных (НД) купратных ВТСП можно считать надежно установленным фактом то, что на фазовой диаграмме (T, p) , где p — концентрация допирования, температура перехода в псевдощелевое (PG) состояние $T^*(p)$ разделяет области, в которых при $p > p_{\text{сг}}$ нормальное состояние — состояние фермижидкости, а при $p < p_{\text{сг}}$ является состоянием с нефермиевскими носителями заряда. Почти для всех НД ВТСП с достаточной точностью

$$T^*(p) \approx 1250(1 - p/p_{\text{сг}}) \text{ K}, p_{\text{сг}} \sim 0,22, p \neq 0. \quad (1)$$

При этом, как показано в [1], PG и сверхпроводящее состояния сосуществуют. В настоящем сообщении для квазидвумерных НД ВТСП с одной CuO_2 плоскостью развивается подход к PG состоянию как к двумерному (2D) антиферромагнитному (АФМ) состоянию, возмущенному движением носителя заряда, т.е. как к 2D АФМ металлу с нефермиевскими носителями заряда [2–4]. Исходя из предположения, что в CuO_2 плоскости концентрация дырок равна концентрации хаотически располо-

женных в ней ионов Cu^{3+} , проведено обобщение модели локальных замкнутых (ЛЗ) токов Вармы [5,6] для дырки иона Cu^{3+} , окруженного четырьмя ионными комплексами — «квадратами» $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ (или $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$, где стрелка обозначает направление спина меди, см. рис. 1). Энергия невырожденного состояния иона Cu^{3+} выше, чем энергия дважды вырожденного состояния иона Cu^{2+} , и нормальные электрон-колебательные (ЭК) моды ионов кислорода в комплексах $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ или $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ приводят к вибронным переходам из невырожденного состояния иона Cu^{3+} в дважды вырожденное (к $A \rightarrow E$ переходам синглет-дублет). Такие вибронные переходы «молекул» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-} \rightarrow \text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ или $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-} \rightarrow \text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ с возбуждением квазилокального состояния дырки можно назвать «обратным» эффектом Яна-Теллера (ЯТ), который приводит к переходу НД антиферромагнетика (АФ) в состояние 2D АФМ металла.

Обратный эффект Яна-Теллера

Правила отбора для вибронных переходов в молекуле обсуждались в обзорах [7,8]. В классической работе Лонгет-Хиггинса и др. [9] убедительно показано существование разрешенных $A \rightarrow E$ переходов с расщеплением энергетической зоны, величина которого тем больше, чем сильнее ЯТ взаимодействие. Экспериментальные исследования таких переходов в спектрах поглощения ионов Fe^{2+} в кристаллах тригональной и кубической симметрии обсуждаются в обзоре [7].

Предположим, что d -дырка примесного иона Cu^{3+} взаимодействует только с ЭК ЯТ модами Q_k ближайших ионов кислорода, общих с соседними комплексами $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ (рис. 1). Например, дырка иона Cu^{3+} , замещающего ион Cu^{2+} , переходит в коллективизированное «молекулой» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ состояние с четырьмя ЛЗ токами, т.е. в состояние со «смешанной» симметрией $d_{x^2-y^2} \pm i(p_x \pm p_y)$ [6] ($d_{x^2-y^2}$ — состояние «медной» дырки, p_x, p_y — состояния «кислородной» дырки). С учетом компенсации токов $\text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-}$ в соседних квадрантах молекулы такие ЛЗ токи образуют круговой ток вокруг комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$, который можно рассматривать как квазилокальное состояние «медь-кислородной» дырки*, т.е. вихре-подобное состояние — 2D антивихрь v_{\uparrow} (или 2D вихрь v_{\downarrow} вокруг комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$). В зависимости от того, в какой

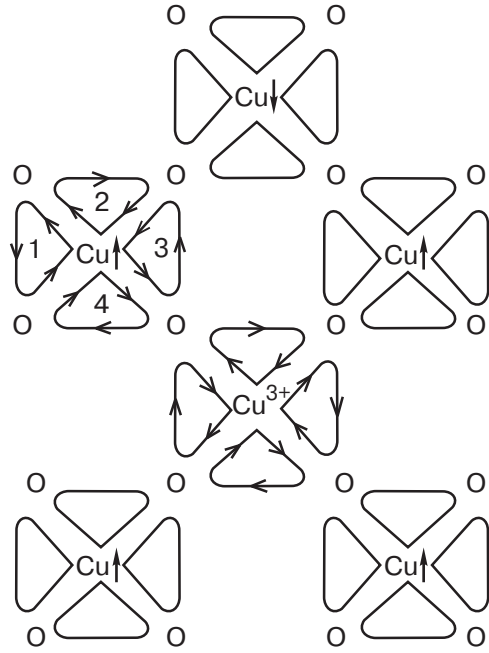


Рис. 1. Локальные токи v_i (замкнутые линии) в квадрантах ионных комплексов CuO_4 медь-кислородной плоскости: токи Вармы в четырех комплексах $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ и в комплексе $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ с магнитными моментами m_{v_i} токов v_i в четырех квадрантах $\sum_{i=1}^4 m_{v_i} = 0$ (1),(3); вихревой ток v_{\uparrow} в «молекуле» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-} \rightarrow \text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-} + v_{\uparrow}$ с магнитным моментом $m_{v_{\uparrow}} = \sum_{i=1}^4 m_{v_i} = -m_{\text{Cu}^{2+}}$ (2),(4). Стрелки на замкнутых линиях, указывающие направление токов, проставлены только в двух комплексах, ион Cu^{3+} занимает позицию в магнитной подрешетке Cu^{2+} . Переход вихревого тока v_{\uparrow} с «молекулы» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ на комплекс $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ с ионом меди из той же магнитной подрешетки создает динамический эффект перемещения иона Cu^{3+} на место иона Cu^{2+} и перехода «молекулы» $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ в комплекс $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$.

магнитной подрешетке был расположен ион Cu^{3+} условие сохранения магнитного момента в «молекуле»

$$m_{\text{Cu}^{3+}} = m_{\text{Cu}^{2+}} + m_{v_{\uparrow}} = m_{\text{Cu}^{2+}} + m_{v_{\downarrow}} = 0$$

определяет направление ЛЗ тока**: v_{\downarrow} — по часовой стрелке, v_{\uparrow} — против часовой стрелки, например, ($m_{v_{\uparrow}} = -m_{\text{Cu}^{2+}}$, $m_{v_{\downarrow}} = -m_{\text{Cu}^{2+}}$ — магнитные моменты кругового тока вокруг комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ или

* «Смешанная» симметрия состояния дырки свидетельствует о том, что переход дырки в квазилокальное состояние нельзя считать ионизацией иона Cu^{3+} .

** Следует отметить, что сумма магнитных моментов m_{v_i} ЛЗ токов Вармы v_i в квадрантах комплексов $\text{Cu}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ равна нулю.

$\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$, определяющие направление круговых токов). Вихри v_{\downarrow} и v_{\uparrow} с малым затуханием могут перемещаться в плоскости CuO_2 по магнитной подрешетке того иона $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}$ (или $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}$), место которого занимал ион $\text{Cu}_{\downarrow}^{3+}$, что создает динамический эффект перемещения иона $\text{Cu}_{\downarrow}^{3+}$ на место иона $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}$ и перехода «молекулы» $\text{Cu}_{\downarrow}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ в комплекс $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$. Таким образом, вибранные $A \rightarrow E$ переходы с расщеплением энергетической зоны приводят к обратному ЯТ эффекту с переходом НД АФ в состояние, которое можно назвать 2D АФМ металлом с двумя типами квазилокальных носителей заряда (двумерных вихрей v_{\downarrow} и антивихрей v_{\uparrow}), статистика которых отличается от статистики Ферми.

Для существования такого состояния необходимо выполнение двух условий.

1. Квазидвумерность образца.

2. Переход иона меди $A \rightarrow E$ из невырожденного состояния в вырожденное $\text{Cu}_{\downarrow}^{3+}\text{O}_4^{2-} \rightarrow \text{Cu}_{\downarrow}^{2+}\text{O}_4^{2-} + v_{\uparrow}$ (если $\text{Cu}_{\downarrow}^{3+}$ занимал место иона $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}$) и $\text{Cu}_{\uparrow}^{3+}\text{O}_4^{2-} \rightarrow \text{Cu}_{\uparrow}^{2+}\text{O}_4^{2-} + v_{\downarrow}$ (если ион $\text{Cu}_{\uparrow}^{3+}$ занимал место $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}$), который приводит к согласованному упорядочению магнитных моментов дырок и ионов меди в CuO_2 плоскости при $T \leq T_f(p)$. Поэтому область существования 2D АФМ металла на фазовой диаграмме ограничена линиями $T^*(p)$, $T_f(p)$ и $T_g(p)$, где $T_g(p)$ — температура перехода 2D АФМ металла в состояние 3D кластерного стекла*.

Возможность экспериментального подтверждения существования 2D АФМ металла

Модель PG состояния как 2D АФМ металла с расщепленными на две энергетическими зонами носителей заряда — 2D вихрей и антивихрей, не подчиняющихся статистике Ферми, так же как и структура ЛЗ токов Вармы [5,6], приводит к нарушению симметрии обращения времени, при котором происходит спонтанное упорядочение без нарушения трансляционной симметрии. Предложенный в [5,6] эксперимент наблюдения ЛЗ токов заключался в измерениях интенсивности фотоэмиссионного спектра (ARPES) с правой и левой циркулярной поляризацией света и в анализе относительной разности полученных спектров циркулярного дихроизма. Эти измерения были осуществлены двумя группами: на тонких НД пленках Bi2212 [10], и на НД монокристаллах Y-Pb-Bi2212 ($T_c = 80$ К) и передопированных Pb-Bi2212 ($T_c = 72$ К) [11]. Полученные результаты свидетельствуют о том, что дихроизм

наблюдался как в НД [10], так и в передопированных образцах [11], что можно объяснить двухслойным расщеплением на двух CuO_2 плоскостях элементарной ячейки этих соединений.

Для подтверждения высказанной в [5,6] гипотезы о существовании ЛЗ токов в НД ВТСП необходимо проводить такие измерения на образцах с одной CuO_2 плоскостью в элементарной ячейке. Идеальным объектом для таких исследований могут быть монокристаллы $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$, для которых измерения ядерного магнитного резонанса [1] позволили установить область PG состояния и показали, что состояние ферми-жидкости присуще только передопированным образцам. Изучение фотоэмиссионных спектров может дать ответ и на актуальный для НД ВТСП вопрос о роли взаимодействий вдоль оси c . Для этого необходимо провести измерения, аналогичные проведенным в Bi2212 (см. [12], рис. 4), для энергий равных $\varepsilon_F \pm 30$ мэВ при двух близких к $T^*(p)$ значениях температуры $T^*(p) \pm \Delta$. Заметное различие уширения спектральных линий при $T^*(p) - \Delta$ и $T^*(p) + \Delta$ позволило бы судить о размерности PG состояния. На этих же образцах с концентрацией допирования $p_2 < p < p_{cr}$ было бы очень интересно провести измерения сопротивления в магнитном поле $H > H_{c2}(p_2)$ (определяется равенством $T_f(p_2) = T^*(p_2)$). Это дало бы возможность при понижении температуры наблюдать в нормальном состоянии образца два перехода с изменением размерности состояния: 1) переход от 3D фермиевского металла к 2D АФМ металлу при $T^*(p)$; 2) при более низких температурах $T_g(p)$ — переход 2D АФМ металла в состояние 3D кластерного спинового стекла. Наблюдение узкой линии ЭПР сигнала при $T < 150$ К [13] является убедительным свидетельством существования металлических областей в слабо допированном $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $0,01 \leq x \leq 0,06$.

В заключение приведем слова Д. Пайнса [4]: «It is electronic and magnetic origin» о механизме высокотемпературной сверхпроводимости. Эти слова могут быть ответом и на вопрос о природе псевдощелевого состояния: это двумерный АФМ металл с двумя типами квазилокальных состояний медь-кислородной дырки — вихрями и антивихрями, каждый из которых движется по своей магнитной подрешетке.

1. G-Q Zheng, P.L. Kuhns, A.P. Reyes, B. Liang, C.T. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047006 (2005).
2. В.Г. Барьяхтар, В.М. Локтев, *УФЖ* **36**, 850 (1991).

* Предположение о том, что линия $T^*(p)$ ограничивает область существования 2D АФМ металла приводит к естественному равенству $T^*(p_{cr}) = T_g(p_{cr})$.

3. В.М. Локтев, *ФHT* **31**, 645 (2005).
4. D. Pines, *Pseudogap Behavior in Underdoped Cuprates*, *cond-mat/0404151*.
5. Tai-Kai Ng and C.M. Varma, *Phys. Rev.* **B70**, 054514 (2004).
6. M.E. Simon and C.M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 247003 (2002).
7. M.D. Sturge, *Solid State Physics* **20**, 91 (1967).
8. H. Sponer and E. Teller, *Rev. Mod. Phys.* **13**, 75 (1941).
9. H.C. Longuet-Higgins, U. Opik, M.H. Pryce, and H. Sack, *Proc. Roy. Soc.* **A244**, 1 (1958).
10. A. Kaminski, S. Rozenkranz, H.M. Fretwell, J.C. Campuzano, Z. Li, H. Raffy, W.G. Gullen, H. You, C.G. Olson, C.M. Varma, and H. Hochst, *Nature (London)*, **416**, 610 (2002); *cond-mat/0204106*.
11. S.V. Borisenko, A. Kordyuk, S. Legner, M.S. Golden, M. Sing, R. Claessen, A. Yaresko, H. Berger, C. Grazioli, and S. Turchini, *cond-mat/0313036*.
12. A. Banzil, M. Lindroos, S. Sahrakorpi, and R.S. Markievicz, *Phys. Rev.* **B71**, 012503 (2005).
13. A. Shengelaya, M. Bruun, B.I. Kochelaev, A. Safina, K. Konder, and K.A. Muller, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 017001 (2004).

The underdoped cuprate antiferromagnet as a two-dimensional antiferromagnetic metal

G.G. Sergeeva

For quasi-two-dimensional underdoped cuprate HTSCs with a single CuO_2 plane an approach to the problem of a pseudogap state is developed as that to a two-dimensional antiferromagnetic metal with non-Fermi charge carriers. The Varma model of local closed currents is generalized for a hole of the Cu^{3+} ion surrounded by four oxygen complexes $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ (or $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$). It is shown that the inclusion of electron-vibration interactions leads to vibron transitions from the nondegenerate state of the Cu^{3+} ion to a doubly degenerate state of $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}$ (or $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}$) with energy band splitting for two types of quasi-local states of the «copper-oxygen» hole (vortices or antivortices), each moving in its magnetic sublattice. The transition of the vortex current from the $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ «molecule» to the $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$ complex with the Cu^{3+} ion from the same magnetic sublattice gives rise to a dynamical effect of the displacement of Cu^{3+} into position of $\text{Cu}_{\downarrow}^{2+}$ and the transitions of $\text{Cu}^{3+}\text{O}_4^{2-}$ to $\text{Cu}_{\uparrow}^{2+}\text{O}_4^{2-}$.