

# Фазовая диаграмма $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , как ключ к пониманию природы ВТСП

К.В. Мицен, О.М. Иваненко,

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) является наиболее исследованным ВТСП соединением, чья фазовая диаграмма проявляет множество хорошо воспроизводимых особенностей и подробно изучена во всем диапазоне допирования. В настоящей работе фазовая диаграмма LSCO проанализирована на основе модели [1], предполагающей, что механизмом, ответственным за многие аномальные свойства ВТСП, включая высокотемпературную сверхпроводимость, является взаимодействие электронов с двухатомными отрицательными-У центрами (NUC).

Согласно модели NUC образуются при определенном уровне допирования на паре соседних катионов Cu. Их формирование оказывается возможным, благодаря локализации допированных зарядов в окрестности примесных ионов Sr. Мы будем исходить из электронного спектра СТ-диэлектрика (рис. 1а). В этой схеме энергия  $\Delta_{ct}$  соответствует переходу электрона с кислорода на соседний ион меди. Дырка при этом распространена по 4 окружающим кислородным ионам вследствие перекрытия орбиталей соседних кислородных ионов ( $t_{oo}$ ) (рис. 1б). Это образование напоминает водородный атом. Можно далее предположить, что энергия двух возбуждений будет меньше, если два таких псевдоатома находятся рядом и образуют псевдомолекулу (рис. 1г). Понижение энергии (рис. 1в) возникает за счет Гайтлер-Лондоновского взаимодействия и имеет место для связывающей орбитали синглетной дырочной пары. Т.е. когда дырки могут одновременно притягиваться к двум катионам.

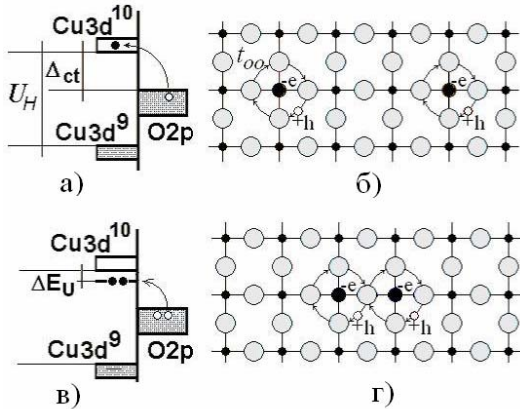


Рис. 1 (см. текст)

Помимо внешнего сходства дополнительным основанием для такого предположения служит тот факт, что в ВТСП расстояние между катионами  $\approx 3,7-4,0 \text{ \AA}$ , что приблизительно равно произведению  $R_0 \cdot \epsilon_\infty$ , где  $R_0 = 0,8 \text{ \AA}$  – расстояние между яд-

рами в молекуле  $\text{H}_2$ , а  $\epsilon_\infty$  – высокочастотная диэлектрическая постоянная, которая для всех ВТСП равна 4,5-5,0. Т.е. в ВТСП сама природа создала условия для формирования внутри кристалла таких псевдомолекул. Если теперь каким-то образом уменьшить  $\Delta_{ct}$  до тех пор, пока щель для двухчастичных переходов исчезнет, а для одночастичных еще сохранится, то мы получим систему, в которой электроны кислородной зоны могут эффективно взаимодействовать с парными состояниями NUC. Именно в этом по нашему мнению и состоит роль допирования.

Мы будем полагать, что допированные заряды (дырки) жестко локализованы в ячейке, содержащей допант. В случае допированная дырка локализована в кислородном квадрате в плоскости  $\text{CuO}_2$ . Рассмотрим кластер  $\text{Cu}_2\text{R}_2\text{O}_n$ . Здесь пара Cu ионов встроена в  $\text{CuO}_2$  плоскость, а ионы R – это соседние с ними ионы Cu, которые находятся либо в цепочках, как в случае YBCO, либо в  $\text{CuO}_2$  плоскости, как в случае LSCO. Наше утверждение состоит в том, что для формирования NUC на паре соседних Cu ионов необходимо, чтобы в окрестности иона R (на расстоянии  $\sim a$  от Cu ионов) находилась допированная дырка. Согласно простой оценке допированная дырка, локализованная на одном из 4-х кислородных ионов может понизить энергию состояния  $\text{Cu}3d^{10}$  для одного из четырех соседних ионов Cu, т.е. уменьшает щель  $\Delta_{ct}^0$  для одноэлектронных переходов на этот ион Cu на 1,8 эВ, т.е. на величину, сравнимую с  $\Delta_{ct}^0 \sim 2\text{eV}$ . Если два таких иона находятся рядом, то этого понижения оказывается достаточно, чтобы стали возможны двух электронные переходы на эту пару Cu-ионов с образованием двух дырок в малой окрестности этой пары.

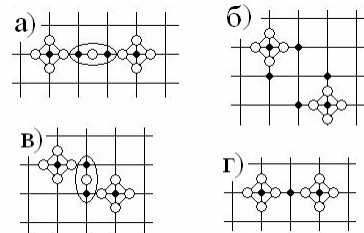


Рис. 2 (а, в) – два типа кластеров  $\text{Cu}_2\text{R}_2\text{O}_n$  ( $n=3$  и  $a\sqrt{5}$ ), формирующих NUC на внутренних ионах Cu; б) «промежуточный» между а) и в) случай ( $l=a\sqrt{8}$ ), когда NUC не образуется; соответствует изолятору; г)  $l=2a$ ; соответствует «металлической» фазе.

В LSCO для образования NUC необходимо, чтобы ионы R находились на расстоянии  $l=3a$  или  $a\sqrt{5}$  (рис.2а,б). Важно отметить, что при промежу-

точном расстоянии  $a\sqrt{8}$  (рис.2 в) нельзя выделить такую пару соседних Cu-ионов и NUC не образуется. Как мы увидим в дальнейшем это и есть причина 1/8-аномалии. Если в окрестности данного иона находятся два допированных заряда, то для него  $\Delta_{ct}$  обращается в нуль и для одноэлектронных переходов (рис.2 г).

Поскольку NUC является фактически парным акцептором, их формирование приводит к переходу электронов с кислорода на медь и образованию дырок локализованных в окрестности NUC. Дырочная проводимость в такой системе возможна, если области локализации дополнительных дырочных пар образуют перколяционный кластер или, иначе, при формировании перколяционной цепочки из NUC.

В общем случае, при случайном распределении допированных зарядов нельзя ожидать образования протяженных перколяционных кластеров NUC. Для перколяции необходимо иметь упорядоченное расположение NUC и, следовательно, упорядоченное распределение допантов. В работе [2] мы предложили "электростатический" механизм такого упорядочения, приводящий к заполнению проекциями атомов Sr позиций в определенных квадратных решетках с различными параметрами  $l_{com}$  (соизмеримыми с постоянной решетки  $\text{CuO}_2$  плоскости). Предполагая, что энергии решеток с различными  $l_{com}$  близки, можно полагать [2], что при данном  $x$  будут сосуществовать домены с различными типами решеток

$$0,638/\sqrt{x} < l_{com} \leq 1/\sqrt{x} \quad (1)$$

Это предполагает при данном  $x$  сосуществование различных доменов в  $\text{CuO}_2$  плоскости, в каждом из которых идет заполнение допированными дырками решетки с  $l_{com}$ , удовлетворяющим условию (1). С ростом  $x$  доля занятых узлов изменяется от 0,5 (при  $x=1/2l_{com}^2$ ) до 1 (при  $x=1/l_{com}^2$ ). В свою очередь, существование доменов с данным  $l_{com}$  возможно при концентрации, удовлетворяющей условию [2]

$$0,407/l_{com}^2 < x \leq 1/l_{com}^2.$$

Можно определить области перколяции по узлам для решеток с различными  $l_{com}$ , т.е. области концентраций, соответствующих существованию непрерывных кластеров различных фаз. Порог перколяции  $x_{p0}$  для данного  $l_{com}$  при случайном распределении по узлам  $x_{p0}=0,593/l_{com}^2$  [3]. На рис. 3а приведены интервалы концентраций, соответствующие перколяции по узлам в доменах с  $l_{com}=3, \sqrt{5}, \sqrt{8}$  и 2. Т.е. интервалы, где согласно вышесказанному возможно существование перколяционных кластеров с  $l=\sqrt{5}$  и 3 (т.е. цепочек NUC), кластера с  $l=2$ , соответствующего фазе обычного металла, и кластера с  $l_{com}=\sqrt{8}$ , соответствующего диэлектрической фазе. Здесь сплошными линиями показаны границы областей перколяционных ломаных с дли-

ной звена  $l_{com}$ . Как видно из рис.3а объемная сверхпроводимость (домены с перколяционными цепочками NUC), существуют в областях  $0,066 < x < 0,11$  и  $0,12 < x < 0,20$ . В области  $0,15 < x < 0,20$  сосуществуют как сверхпроводящие домены (в которых существуют перколяционные кластеры с  $l=\sqrt{5}$ ), так и домены нормального металла, причем с ростом  $x$  число нормальных доменов растет. Это соответствует переходу в состояние, когда сверхпроводимость осуществляется лишь за счет эффекта близости, с монотонным понижением  $T_c$  с ростом  $x$ .

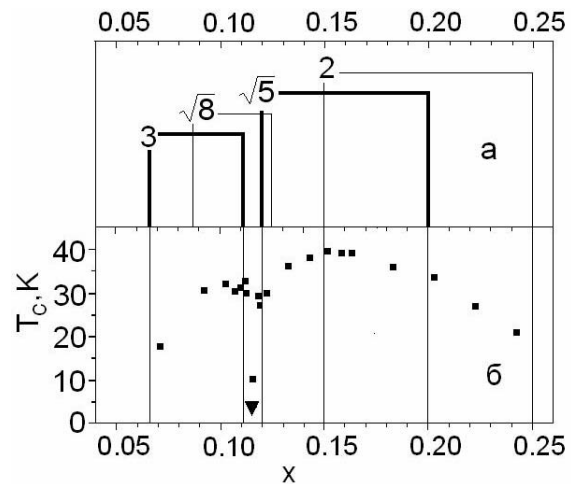


Рис. 3. (а) - Интервалы концентраций, соответствующие перколяции по узлам в доменах с  $l_{com}=3, \sqrt{8}, \sqrt{5}$  и 2. Сплошными линиями показаны границы областей перколяционных ломаных с длиной звена  $l_{com}$ . Жирными линиями отмечены границы существования перколяционных кластеров NUC. Соответствующее значение  $l_{com}$  указано над левым верхним углом каждого прямоугольника. (б) Экспериментальные фазовые диаграммы  $T_c(x)$  для LSCO. [4].

Совпадение интервалов сверхпроводимости на экспериментальных фазовых диаграммах (рис. 3б) с областями перколяции для  $l_{com}=\sqrt{5}$  и 3 подтверждает вывод о том, что за сверхпроводимость в LSCO ответственны именно рассматриваемые фрагменты, включающие пары соседних Cu ионов в  $\text{CuO}_2$  плоскости и является свидетельством в пользу предложенной модели ВТСП. В рамках данной модели основные особенности экспериментальных фазовых диаграмм LSCO отражают лишь геометрические соотношения, существующие в квадратной решетке, и конкуренцию между различными типами упорядочения Sr. Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке РФ (контракт № 40.012.1.1.1357).

1. К.В. Мицен, О.М. Иваненко. УФН, 174, 545 (2004).
2. К.В. Мицен, О.М. Иваненко. Тезисы докладов FPS'04. (2004)
3. R. M. Ziff, Phys. Rev. Lett. **69**, 2670 (1992).
4. K. Kumagai et al., J. Supercond. **7**, 63 (1994).