

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННО-ДОПИРОВАННЫХ КУПРАТОВ

Н. А. Бабушкина^{a*}, *А. А. Владимиров*^b, *К. И. Кугель*^{c,d}, *Н. М. Плакида*^b

^a *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

^b *Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия*

^c *Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

^d *Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики
101000, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 марта 2020 г.,
после переработки 25 марта 2020 г.
Принята к публикации 20 апреля 2020 г.

Проанализированы экспериментальные данные по температурной зависимости электросопротивления электронно-допированных купратов $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ в широком интервале значений концентрации цезия $0.12 \leq x \leq 0.20$. Показано, что в широкой области температур выше температуры сверхпроводящего перехода в основном наблюдается квадратичная зависимость электросопротивления от температуры, величина которого резко уменьшается при концентрациях $x \geq 0.17$. Теоретический анализ на основе микроскопической теории в рамках t - J -модели для сильнокоррелированных электронов показывает, что квадратичная зависимость электросопротивления от температуры определяется рассеянием электронов на спиновых возбуждениях. Для их описания предложена модель антиферромагнитных спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе, интенсивность которых зависит от антиферромагнитной корреляционной длины. Полученная квадратичная зависимость электросопротивления от температуры хорошо согласуется с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0044451020100144

1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени открытия Беднорцем и Мюллером высокотемпературной сверхпроводимости в купратах прошло уже более 30 лет [1]. За это время были найдены многие новые классы высокотемпературных сверхпроводников, и не только купратных. Температура сверхпроводящего перехода существенно выросла. Однако, несмотря на огромный прогресс в этой области, многие важные вопросы даже в области купратов еще довольно далеки от полного решения (см., например, [2]). Одной из таких проблем является сильная асимметрия электронных характеристик дырочно- и электронно-допированных

купратов. Действительно, если взглянуть на фазовую диаграмму сверхпроводящих купратов [3], то в области электронного допирования сверхпроводимость существует в гораздо более узком интервале концентраций допирующего элемента, в то время как область существования антиферромагнитного (АФМ) состояния занимает существенно большую площадь. Более того, если в дырочных купратах сверхпроводящая и АФМ-области сравнительно далеко разнесены друг от друга, то в электронных они практически перекрываются. Наличие более обширной АФМ-области указывает на существование более сильных АФМ-корреляций в электронных сверхпроводниках, что подтверждается детальным теоретическим анализом различий между электронными и дырочными сверхпроводниками в рамках активно используемых модельных подходов [4].

* E-mail: babushkina1937@mail.ru

Вообще говоря, спиновые флуктуации играют важную роль и в электронных, и в дырочных купратах и, по всей видимости, лежат в основе механизма сверхпроводимости в них [5, 6]. Естественно предположить, что такие флуктуации в значительной мере определяют и транспортные характеристики купратов в нормальном состоянии. Большинство работ в этом направлении посвящено соединениям с дырочным допированием, где в широких областях температур и допирования наблюдается близкий к линейному закон для электросопротивления (см., например, работу [7]). В электронно-допированных купратах зарядовый транспорт имеет свои необычные особенности. Так, еще в ранней работе [8] по электронно-допированным сверхпроводникам было показано, что в пленках купрата $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ при достаточно высоком уровне допирования электросопротивление в широком интервале температур ведет себя как T^2 . Такое поведение в обычных металлах характерно для электрон-электронного рассеяния, однако анализ экспериментальных результатов, проведенный в работе [8], показал, что основной вклад в квадратичную температурную зависимость электросопротивления обусловлен рассеянием на спиновых флуктуациях. В настоящей работе мы, используя подход, развитый в работе [9], попытаемся дать количественную интерпретацию квадратичной температурной зависимости электросопротивления в электронно-допированных купратах и сравнить теоретические результаты с полученными ранее экспериментальными данными.

В следующем разд. 2 мы приводим полученные нами экспериментальные данные по температурной зависимости электросопротивления в образцах $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ при различных уровнях допирования x . В разд. 3 представлено сравнение наших результатов с данными других работ. В разд. 4 проводится теоретический анализ температурной зависимости в рамках t - J -модели с учетом рассеяния носителей тока на спиновых флуктуациях. В заключении дается обсуждение полученных результатов. В Приложение вынесены детали расчета электронного спектра электронно-допированных купратов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

2.1. Образцы

Образцы представляли собой эпитаксиальные пленки $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ (NCCO) с различными уровнями допирования церием x . Величина x изменялась в достаточно широком интервале, включая

области оптимального допирования ($x = 0.15$), ниже оптимального ($x = 0.12, 0.14$) и выше оптимального ($x = 0.17, 0.18, 0.20$). На каждом из образцов измерялось электросопротивление $\rho(T)$ в широком температурном интервале. Измерения на эпитаксиальных пленках дают возможность получить достоверные данные о температурной зависимости электросопротивления в плоскости ab .

Рост эпитаксиальных пленок проводился с помощью лазерного напыления на оптически полированные подложки (100) SrTiO_3 . Пленки затем отжигались при температуре 780°C и давлении $P \sim 10^{-2}$ Торр в течение 40 мин, что способствовало формированию кислородного дефицита и образованию сверхпроводящей фазы. Проведенный рентгенофазовый анализ показал, что для всех составов кристаллографическая ось c направлена по нормали к плоскости пленки и ориентирована вдоль (001). Особенности процесса роста и основные характеристики полученных пленок подробно описаны в работе [10].

Измерения электросопротивления $\rho(T)$ пленок проводились с использованием стандартной четырехконтактной методики на переменном токе с амплитудой измеряемого тока около 200 мкА.

2.2. Результаты измерений

Измерения электросопротивления $\rho(T)$ пленок NCCO проводились в интервале температур от 4 до 300 К. При росте содержания церия менялся общий характер поведения $\rho(T)$ (рис. 1), от несверхпроводящего (при $x = 0.12$) к сверхпроводящему ($x = 0.14$ – 0.18) и снова к несверхпроводящему ($x = 0.20$). Максимальная температура T_c сверхпроводящего перехода оказывается равной 23 К при $x = 0.15$. Возникновение сверхпроводимости взаимосвязано с переходом от полупроводникового поведения $\rho(T)$ к металлическому. Поведение $\rho(T)$, характерное для металлов, наблюдается и у несверхпроводящих составов NCCO при $x = 0.20$. С ростом x от 0.15 до 0.20 прослеживается также тенденция к падению электросопротивления в нормальном состоянии.

Во всех изучаемых образцах NCCO температурная зависимость электросопротивления близка к квадратичной. Таким образом, для $\rho(T)$ с хорошей точностью выполняется соотношение

$$\rho(T) = \rho_0 + AT^2. \quad (1)$$

Отметим, что для всех составов при температурах $T > 250$ К имеют место отклонения от квадра-

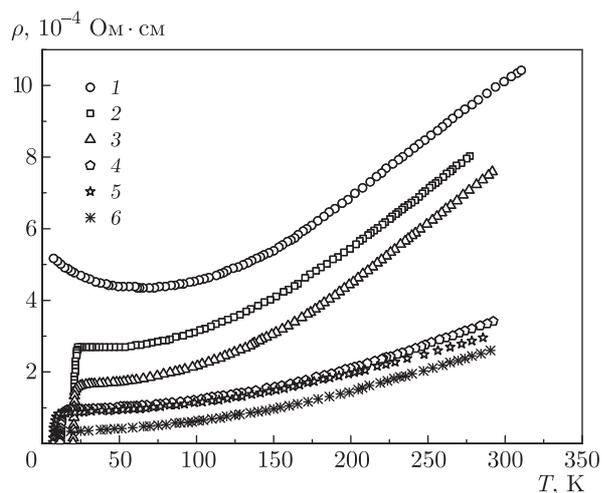


Рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления NCCO при различных значениях x : 1 — 0.12; 2 — 0.14; 3 — 0.15; 4 — 0.17; 5 — 0.18; 6 — 0.20 [8]

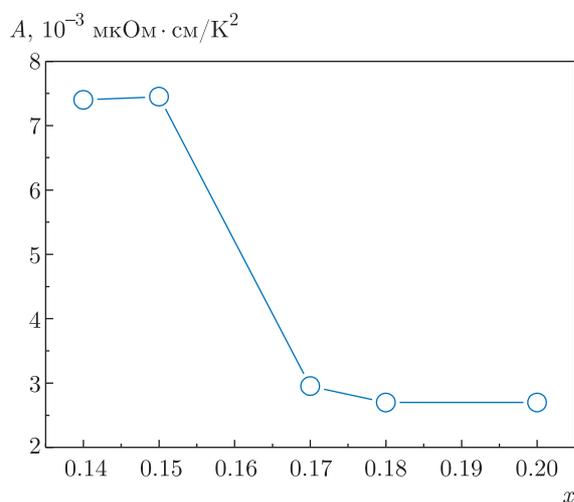


Рис. 2. Зависимость коэффициента A при квадратичном члене в выражении (1) для $\rho(T)$ от концентрации x церия [8]

точного закона. На рис. 2 приведена концентрационная зависимость коэффициента $A(x)$. Можно видеть, что при $x = 0.14$ и $x = 0.15$ величина A фактически одинакова, а при $x = 0.17$ этот коэффициент резко уменьшается, а затем практически не зависит от содержания церия, несмотря на то что при $x = 0.17, 0.18$ система переходит в сверхпроводящее состояние, а при $x = 0.20$ она является несверхпроводящей.

Такое сильное падение величины электросопротивления при больших концентрациях церия $x > 0.17$ объясняется далее, в разд. 4, уменьшением АФМ корреляционной длины ξ с допированием.

3. ОБСУЖДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

3.1. Температурная и концентрационная зависимости электросопротивления

Одна из фундаментальных проблем в физике высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) — это выявление природы температурной зависимости электросопротивления $\rho(T)$ в нормальном состоянии. Линейный температурный ход $\rho(T)$, обычно характерный для купратов с дырочным допированием (ВТСП p -типа) вблизи оптимального допирования [7], не выполняется для электронно-допированных купратных сверхпроводников (ВТСП n -типа) $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ (LCCO), где $\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Pr}, \text{Sm}$. В данных материалах в интервале температур $T = 50\text{--}200$ К наблюдается квадратичная зависимость (1). Прежде чем перейти к теоретическому рассмотрению электронно-допированных купратов, мы дадим более широкий обзор экспериментов, касающихся данного класса материалов, и проведем сравнение с соответствующими данными для дырочно-допированных купратов.

В значительном числе экспериментальных работ, в которых описывалась квадратичная температурная зависимость $\rho(T)$, исследования проводились для системы NCCO с оптимальным содержанием церия ($x = 0.15$), см., например, работы [11, 12]. В них обсуждался электрон-электронный механизм рассеяния, который приводит к квадратичной зависимости электросопротивления в обычных металлах. Однако такое поведение в обычных металлах наблюдается лишь в области низких температур, в то время как в ВТСП n -типа квадратичная зависимость сохраняется вплоть до 300 К. Как отмечается в работах [13, 14], электрон-электронный механизм оказывается не вполне адекватным в данном случае. Действительно, стандартные теоретические оценки коэффициента A дают величины существенно ниже экспериментальных ($A \sim 10^{-12}$ мкОм·см/К²).

В работе [11] был проведен также анализ роли электрон-фононного рассеяния носителей тока. Оценки величины электросопротивления, выполненные с использованием данных о спектре электрон-фононного взаимодействия, полученных в туннельных экспериментах, приводят к линейной зависимости $\rho(T)$ в области температур выше 50 К, вклад которой составляет примерно лишь 1/3 от полного сопротивления при 300 К. Таким образом, эти механизмы рассеяния не могут быть основными при анализе квадратичной зависимости $\rho(T)$.

Для понимания особенностей поведения электро-сопротивления и других явлений переноса необходимо исследовать зависимость $\rho(T)$ от допирования. Такие исследования системы NCCO в широком интервале значений x были проведены в нашей работе и ряде других. В работе [15] были исследованы электросопротивление и холловский коэффициент R_H в интервале значений $0.13 \leq x \leq 0.19$. Низкотемпературное поведение в области $0.35 \text{ K} \leq T \leq 20 \text{ K}$ описывалось формулой $\rho(T) = \rho_0 + C T^\beta$, где показатель степени β в области концентраций $x = 0.16\text{--}0.17$ приближается к значению $\beta \approx 1$. Вне этой области $\beta \approx 1.5$. Такую смену зависимости авторы объясняют квантовым фазовым переходом при $x_c = 0.165$, возможно связанным с переходом в АФМ-фазу. Высокотемпературное поведение при $T > 50 \text{ K}$ характеризуется квадратичной зависимостью (1). В последующей работе [16] были исследованы зависимости $\rho(T)$ и R_H в области высоких температур. Во всей области концентраций температурная зависимость нормализованной величины электросопротивления $[\rho(T) - \rho(100 \text{ K})]/\rho(300 \text{ K})$ была описана единой кривой для всех концентраций церия, что привело авторов к выводу, что носителями заряда являются электроны, поскольку в ВТСП p -типа подобная зависимость не наблюдается.

Детальное исследование электросопротивления в соединении LSCO в работе [17] привело авторов к близким выводам: в области малых концентраций $0.11 \leq x \leq 0.17$ и низких температур $T \lesssim 20 \text{ K}$ наблюдается линейная температурная зависимость $\rho(T) = \rho_0 + A_1 T$, а в области высоких концентраций $x \geq 0.18$ возникает квадратичная зависимость $\rho(T) = \rho_0 + A_2 T^2$ от высоких температур до низких, вплоть до 20 мК, которую авторы объясняют электрон-электронным рассеянием. Следует отметить, что коэффициент A_2 резко уменьшается с ростом x , как и коэффициент A для NCCO в нашей работе, представленный на рис. 2. Смена режима поведения при $x_c = 0.17$ авторы объясняют квантовым фазовым АФМ-переходом. Линейную температурную зависимость $\rho(T)$ при концентрации $x \leq x_c$, совпадающей с появлением сверхпроводимости при T_c , авторы связывают с рассеянием электронов на спиновых флуктуациях и делают вывод о спин-флуктуационном механизме спаривания. Квадратичная температурная зависимость электросопротивления наблюдалась также в работе [18], где исследовался эффект Нернста в $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Как и в нашей работе, наблюдалось значительное уменьшение электросопротивления при переходе от низких концентраций ($x = 0.13, 0.14$) к высоким ($x =$

$= 0.15, 0.17$). Как мы обсуждаем далее, в нашей теории спиновые флуктуации определяют квадратичную зависимость $\rho(T)$ по крайней мере в области температур выше T_c .

Здесь следует обратить внимание на то, что большой квадратичный вклад в $\rho(T)$ ($A \sim 10^{-3} \text{ мКОм}\cdot\text{см}/\text{K}^2$) характерен для переходных и редкоземельных металлов [19], в которых вклад в электросопротивление, обусловленный рассеянием носителей тока на магнитных моментах $3d$ - и $4f$ -электронов, является преобладающим. Поэтому вполне правдоподобным является предположение о том, что и для NCCO квадратичный ход зависимости $\rho(T)$ также определяется магнитным рассеянием носителей тока.

3.2. Спиновые флуктуации

Сравним магнитные характеристики сверхпроводников n -типа NCCO с аналогичной системой сверхпроводников p -типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ (LSCO). Отметим, что обе эти группы купратов имеют ряд общих черт. В частности, Nd_2CuO_4 и La_2CuO_4 — несверхпроводящие прототипы этих двух семейств — антиферромагнетики с температурами Нееля соответственно $T_N = 250 \text{ K}$ и $T_N = 280 \text{ K}$. Однако допирование оказывает различное действие на спиновые АФМ-корреляции в сверхпроводниках n - и p -типов.

В частности, сравнение результатов исследования спектров комбинационного рассеяния для NCCO [20] и LSCO [21] показывает, что величина локального магнитного момента на ионе Cu^{2+} в сверхпроводниках n -типа слабо зависит от допирования церием, в то время как допирование в сверхпроводниках p -типа приводит к уменьшению магнитного момента. В первом случае при малом допировании наблюдается дальний магнитный порядок и эффективный магнитный момент ионов остается довольно большим. При этом в интервале $0 < x < 0.13$, несмотря на уменьшение температуры Нееля T_N , обменное взаимодействие в плоскости CuO_2 оказывается слабо зависящим от концентрации церия. При дальнейшем росте концентрации церия, когда происходит переход к металлическому типу поведения электросопротивления и к сверхпроводимости, магнитные возбуждения существенным образом подавляются, но по-прежнему сохраняется локальный характер магнитных моментов ионов Cu . При этих уровнях допирования магнитная корреляционная длина медленно убывает с ростом концентрации церия. Такой характер изменения магнит-

ных возбуждений соответствует концентрационной зависимости $A(x)$ в NCCO, приведенной на рис. 2.

Различное магнитное поведение электронных и дырочных сверхпроводников обсуждается в работах [22, 23]. Это различие обусловлено тем, что в Nd_2CuO_4 при допировании церием электроны локализуются главным образом на узлах, занятых медью, а дырки, возникающие при допировании La_2CuO_4 стронцием, занимают преимущественно кислородные позиции. Замещение неодима церием в Nd_2CuO_4 (электронное допирование) меняет эффективный заряд на атоме меди ($\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Cu}^{1+}$) [24], в результате чего происходит разбавление магнитной подсистемы Cu^{2+} за счет появления немагнитных ионов Cu^{1+} . Подтверждение теории разбавления магнитной подсистемы при допировании было получено в работе [25], где были исследованы спиновые корреляции и АФМ-порядок в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ методом рассеяния нейтронов. Было показано, что экспериментальные результаты хорошо описываются численными расчетами методом Монте-Карло для АФМ-модели Гейзенберга для спинов $1/2$ при их случайном исключении.

В то же время дырочное допирование La_2CuO_4 меняет валентное состояние иона кислорода ($\text{O}^{2-} \rightarrow \text{O}^{1-}$) [26]. Наличие магнитного кислородного иона между двумя соседними ионами меди приводит к эффективному ферромагнитному взаимодействию ионов меди. Таким образом, в решетке CuO_2 возникают фрустрации АФМ-типа. Такие фрустрации вызывают ослабление магнитных корреляций и, в результате, исчезновение дальнего АФМ-порядка при весьма низких уровнях допирования $x = 0.027$. Таким образом, характерная длина спиновых корреляций в NCCO оказывается больше соответствующей корреляционной длины в LCCO [27]. Фактически, в NCCO возникают локальные магнитные моменты, для которых длина корреляции сравнима с длиной свободного пробега носителей тока, что должно существенным образом влиять на рассеяние носителей тока в купратах n -типа.

Детальное исследование магнитного порядка и АФМ-корреляций в сверхпроводниках n -типа было проведено с помощью рассеяния нейтронов. В работе [28] в монокристаллах $(\text{Nd,Pr})_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ были измерены температурная зависимость трехмерного дальнего АФМ-порядка и двумерной корреляционной длины ξ в несверхпроводящей области ($0 \leq x \leq 0.125$). Было показано, что магнитное поведение для купратов n -типа и p -типа имеет аналогичный характер, но магнитный порядок в купратах n -типа сохраняется в существенно большей области

концентраций. Это различие, как обсуждалось выше, обусловлено разными механизмами подавления магнитного порядка: разбавлением спиновой системы в первом случае и возникновением фрустраций во втором случае.

Упругое рассеяние нейтронов было использовано в работе [29] для исследования зависимости температуры Нееля и АФМ корреляционной длины ξ от допирования в монокристаллах $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в области концентраций $0.10 \leq x \leq 0.17$. Температура Нееля быстро уменьшается вблизи перехода в сверхпроводящую фазу при $x \approx 0.12$, а корреляционная длина от достаточно больших значений, $\xi \approx 200 \text{ \AA}$ при низкой концентрации $x = 0.10$ – 0.13 быстро убывает до значений $\xi \approx 50 \text{ \AA}$ при большой концентрации $x \geq 0.15$. Подробное исследование температурной и концентрационной зависимости корреляционной длины в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ в области концентраций ($0.038 \leq x \leq 0.154$) было проведено в работе [30] методом неупругого рассеяния нейтронов. АФМ-порядок наблюдался при концентрации $x < 0.13$, выше которой возникает сверхпроводимость. Это позволило авторам этой работы сделать вывод об отсутствии сосуществования АФМ- и сверхпроводящей фаз и о наличии квантового фазового перехода между ними. Наблюдаемое в некоторых работах сосуществование этих фаз может объясняться фазовой неоднородностью образцов. Корреляционная длина при низких температурах $T \approx 50 \text{ K}$ достаточно быстро уменьшается вне АФМ-фазы от значений $\xi/a \approx 80$ при $x \approx 0.13$ до $\xi/a \approx 40$ при $x = 0.145$ и $\xi/a \approx 15$ при $x \approx 0.15$, как в работе [29].

Таким образом, исследование спиновых флуктуаций показывает, что они сохраняются в сверхпроводниках n -типа в широкой области концентраций и характеризуются достаточно большой АФМ корреляционной длиной при малой концентрации $x \approx 0.13$, быстро убывая при $x \geq 0.15$.

3.3. Реконструкция поверхности Ферми

В ряде работ при сопоставлении данных по $\rho(T)$ в купратах p - и n -типов отсутствие квадратичной температурной зависимости в купратах p -типа связывали с характерными различиями в геометрии поверхности Ферми в этих ВТСП. Изменение поверхности Ферми с допированием исследуется с помощью измерения фотоэмиссионных спектров с угловым разрешением (angle resolved photoemission spectroscopy, ARPES). В купратах p -типа при допировании наблюдается переход от поверхности Фер-

ми в виде четырех карманов (дуг) вблизи точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ зоны Бриллюэна к большой дырочной поверхности Ферми с центром вблизи точки (π, π) [2].

В купратах n -типа поведение поверхности Ферми с допированием иное: при малом допировании возникает электронная поверхность Ферми в виде карманов вблизи точек $(\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ зоны Бриллюэна, в дополнение к которым с допированием появляются дырочные поверхности Ферми вблизи точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Так, в работе [31] при исследовании $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ показано, что при концентрации $x = 0.04\text{--}0.10$ видна электронная поверхность Ферми в виде упомянутых выше карманов, объем которых пропорционален x , а при допировании $x \geq 0.15$ появляется большая дырочная поверхность Ферми с центром вблизи точки (π, π) , объем которой пропорционален $1+x$. Подобные же результаты были получены в ARPES-исследованиях $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в работе [32] в области АФМ-порядка при $x = 0.13\text{--}0.17$, где авторы объясняют такую реконструкцию поверхности Ферми АФМ-корреляциями. В работе [33] сопоставлялась поверхность Ферми для сверхпроводников n -типа $\text{Ln}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$, $\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}$. При таком допировании ($x = 0.15$) поверхности Ферми этих сверхпроводников имели одинаковую форму в виде описанных выше электронных карманов вблизи точек $(\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ и дырочных поверхностей Ферми вблизи точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$, которые объединялись одной дугой слабой интенсивности в виде большой поверхности Ферми с центром вблизи точки (π, π) . Для описания полученной большой поверхности Ферми использовалась модель электронного спектра в приближении сильной связи при учете АФМ-упорядочения, приводящего к щели в электронном спектре. Эта модель АФМ-спектра предлагается и в других работах, посвященных ARPES-исследованиям (см., например, [34]). Однако в работе [35] эта простая модель спектра, обусловленная дальним АФМ-порядком, подвергается критике, так как две АФМ-ветви спектра имеют разную интенсивность. Одна из них, так называемая теневая ветвь, имеет малую интенсивность и поэтому может быть связана с ближним порядком или многочастичными эффектами, как это обсуждается в теоретической работе [4]. Реконструкция поверхности Ферми без привлечения предположения о дальнем АФМ-порядке также рассматривается в работе [36], посвященной ARPES-исследованию $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в области концентраций $x = 0.15\text{--}0.17$. Авторы объясняют появление щели в спектре при переходе от электронной поверхности

Ферми вблизи точек $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ к дырочной вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна пересечением исходного электронного спектра с теневой зоной.

Подобное же изменение поверхности Ферми при допировании купратов n -типа прослеживается и при наблюдении осцилляций Шубникова–де Гааза, которые позволяют определить объем поверхности Ферми [37–39]. Так, в работе [38] изучается эволюция ферми-поверхности в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ при изменении концентрации от $x = 0.17$ для передопированного образца к образцам с пониженной концентрацией, $x = 0.15, 0.14$. При $x = 0.17$ авторы этой работы наблюдают переход от большой поверхности Ферми размером, составляющим 41% от всей двумерной зоны Бриллюэна, к малой электронной и двум дырочным поверхностям Ферми при $x = 0.15, 0.14$ за счет сворачивания большой зоны Бриллюэна в АФМ-зону Бриллюэна размером $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$. Эта реконструкция объясняется появлением АФМ-порядка с большой корреляционной длиной, значительно превышающей наблюдаемую в рассеянии нейтронов в работе [30]. Возможно, что такое различие связано с влиянием сильного внешнего магнитного поля в эксперименте Шубникова–де Гааза, которое приводит к стабилизации АФМ-порядка.

В работе [39] было продолжено исследование магнитосопротивления кристаллов $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ при изменении концентрации в интервале $0.13 \leq x \leq 0.17$. Авторы приходят к выводу о существовании двух критических точек: $x_c = 0.175$, когда появляется сверхпроводимость, и $x_{opt} = 0.145$ (оптимальное допирование), когда T_c имеет максимальное значение. Ниже этой концентрации предполагается возникновение дальнего АФМ-порядка. В целом, проблема сосуществования АФМ- и сверхпроводящего состояний до конца не выяснена, поскольку результаты рассеяния нейтронов в отсутствие сильного внешнего магнитного поля приводят к выводу об отсутствии такого сосуществования.

Итак, мы проанализировали экспериментальные данные по температурной зависимости электросопротивления $\rho(T)$ в нормальном состоянии электронно-допированных купратов NCCO в широком интервале концентраций церия и связанные с этой проблемой эксперименты по исследованию спиновых флуктуаций и поверхности Ферми. В ряде работ характер изменения электросопротивления связывают с реконструкцией поверхности Ферми, рассмотренной выше. Однако, как показано в следующем разделе, это изменение $\rho(T)$ можно качественно объяснить скорее наличием рассеяния носителей тока на спиновых флуктуациях.

4. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

Роль рассеяния на спиновых флуктуациях в формировании зависимости $\rho(T)$ для ВТСП достаточно широко обсуждалась в теоретических работах, в которых использовались различные феноменологические модели [40–42]. Ниже мы приводим микроскопическую теорию для расчета электросопротивления, обобщая результаты работы [9] на случай электронно-допированных ВТСП, характеризуемых большой величиной АФМ корреляционной длины ξ .

4.1. t - J -модель

Учитывая, что купраты являются системами с сильными электронными корреляциями, определяющими диэлектрическое АФМ-состояние в недопированных соединениях [3], для теоретического рассмотрения мы используем t - J -модель [4]. При электронном допировании заполняется верхняя дырочная зона $\text{Cu}3d^{10}$ при полностью заполненной электронной зоне $3d^9$. В этом случае t - J -модель можно записать в виде

$$H = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (2)$$

где введены операторы рождения и уничтожения электронов в дырочной зоне:

$$\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger = c_{i,\sigma}^\dagger n_{i,\bar{\sigma}}, \quad \tilde{c}_{i,\sigma} = c_{i,\sigma} n_{i,\bar{\sigma}}. \quad (3)$$

Здесь $c_{i,\sigma}^\dagger$ и $c_{i,\sigma}$ — фермиевские операторы рождения и уничтожения электрона со спином $\sigma/2$, $\sigma = \pm 1$ ($\bar{\sigma} = -\sigma$) на узле решетки i , $n_i = \sum_{\sigma} n_{i,\sigma}$ — оператор числа частиц. Множитель $n_{i,\bar{\sigma}} = c_{i,\bar{\sigma}}^\dagger c_{i,\bar{\sigma}}$ в определении (3) показывает, что операторы $\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger$, $\tilde{c}_{i,\sigma}$ действуют в двукратно заполненной зоне при условии $n_{i,\bar{\sigma}} = 1$, так что их спин фиксирован и противоположен электрону в нижней зоне. Операторы спина $1/2$ имеют вид

$$S_i^\alpha = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \tilde{c}_{is}^\dagger \sigma_{s,s'}^\alpha \tilde{c}_{is'}.$$

Обменное АФМ-взаимодействие между спинами для ближайших соседей $\langle ij \rangle$, $i > j$ определяется параметром J .

Химический потенциал μ находится из уравнения для среднего числа электронов с учетом заполненной зоны $\text{Cu}3d^9$:

$$n = 1 + x, \quad x = \frac{1}{N} \sum_i \langle \tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i,\sigma} \rangle, \quad (4)$$

где x — концентрация допированных электронов в верхней зоне, $\langle \dots \rangle$ — статистическое среднее с гамильтонианом (2).

Мы рассматриваем двумерную квадратную решетку для плоскости CuO_2 , где матричный элемент перескока t_{ij} между узлами i и j определяется параметрами t , t' и t'' для перескока между ближайшими соседями, $(\pm a_x, \pm a_y)$, вторыми соседями, $\pm(a_x \pm a_y)$, и третьими соседями, $(\pm 2a_x, \pm 2a_y)$. Фурье-компонента матричного элемента перескока имеет вид

$$t(\mathbf{k}) = 4t \gamma(\mathbf{k}) + 4t' \gamma'(\mathbf{k}) + 4t'' \gamma''(\mathbf{k}), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [\cos(ak_x) + \cos(ak_y)], \\ \gamma'(\mathbf{k}) &= \cos(ak_x) \cos(ak_y), \\ \gamma''(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [\cos(2ak_x) + \cos(2ak_y)]. \end{aligned}$$

Для электронно-допированных соединений мы выберем параметры, предложенные в работе [4]:

$$\begin{aligned} t &> 0, \quad t' < 0, \quad t'' > 0, \\ \frac{t'}{t} &= -0.25, \quad \frac{t''}{t} = 0.12, \end{aligned} \quad (6)$$

которые определяют электронный спектр в виде

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = t(\mathbf{k}) - \mu = 4\gamma(\mathbf{k}) - \gamma'(\mathbf{k}) + 0.48\gamma''(\mathbf{k}) - \mu, \quad (7)$$

где $t = 1$ выбираем за единицу энергии ($t = 0.35$ эВ ≈ 4000 К [4]). При этом минимальная энергия электронов оказывается вблизи точки (π, π) зоны Бриллюэна (в единицах обратной решетки $2\pi/a$, где постоянную решетки $a_x = a_y = a = 1$ принимаем за единицу длины). Электронный спектр (7) соответствует наблюдаемому в ARPES-экспериментах [33, 36]. Фурье-компонента обменного взаимодействия имеет вид $J(\mathbf{q}) = 4J\gamma(\mathbf{q})$, где примем $J = 0.4t$.

Отметим, что составные операторы $\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger$, $\tilde{c}_{i,\sigma}$, включающие произведения трех фермиевских операторов, имеют сложные коммутационные соотношения:

$$\tilde{c}_{i,\sigma} \tilde{c}_{j,\sigma}^\dagger + \tilde{c}_{j,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i,\sigma} = \delta_{ij} (1 - n_{i\sigma}/2 + \sigma S_i^z). \quad (8)$$

На разных узлах, $i \neq j$, они антикоммутируют, как фермиевские операторы, а на одном узле, $i = j$, в правой части уравнения (8) появляются оператор числа частиц $n_{i\sigma}$ и оператор спина S_i^z , которые определяют так называемое кинематическое взаимодействие. Оно приводит к взаимодействию электронов со спиновыми и зарядовыми возбуждениями с большой константой связи, порядка кинетической энергии t_{ij} , много большей, чем обменное АФМ-взаимодействие J . Это взаимодействие определяет электронный спектр и проводимость в купратах, как будет показано ниже.

4.2. Модель спиновых возбуждений

Спектр спиновых возбуждений определяется динамической спиновой восприимчивостью спиновых операторов $S_{\mathbf{q}}^{\pm} = S_{\mathbf{q}}^+ \pm iS_{\mathbf{q}}^-$ [43, 44]:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} = \chi_s(\mathbf{q}) \chi_s(\mathbf{q}, \omega), \quad (9)$$

где $\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}$ — запаздывающая функция Грина для фурье-компонент спиновых операторов $S_{\mathbf{q}}^{\pm}$ [45]. Учитывая, что АФМ-возбуждения имеют максимум на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, для статической восприимчивости $\chi_s(\mathbf{q})$ примем модель

$$\chi_s(\mathbf{q}) = \frac{\chi_Q}{\kappa^2 + (\mathbf{Q} - \mathbf{q})^2}. \quad (10)$$

Здесь $\kappa = 1/\xi$, где ξ (в единицах a) — АФМ корреляционная длина.

Для дальнейших вычислений нам потребуется спектральная плотность спиновых возбуждений, определяемая мнимой частью зависящей от частоты восприимчивости $\chi_s(\mathbf{q}, \omega)$ в формуле (9), которая имеет вид [43]

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_s(\mathbf{q}, \omega) &= \chi_s''(\mathbf{q}, \omega) = \\ &= \omega_{\mathbf{q}} \frac{\omega \eta_{\mathbf{q}}}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + (\omega \eta_{\mathbf{q}})^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\omega_{\mathbf{q}}$ — частота спиновых возбуждений и $\eta_{\mathbf{q}}$ — их затухание. Частота спиновых возбуждений в парамагнитной фазе антиферромагнетика может быть представлена в виде

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{Q}} + 2J\sqrt{1 - \gamma^2(\mathbf{k})},$$

где $\omega_{\mathbf{Q}} \propto J/\xi$ — щель в спектре на волновом векторе \mathbf{Q} . При переходе в АФМ-состояние с дальним порядком корреляционная длина $\xi \rightarrow \infty$ и щель в спектре исчезает, $\omega_{\mathbf{Q}} \rightarrow 0$. При проведении численных расчетов мы учтем, что основной вклад в восприимчивость, согласно формуле (10), дают волновые

векторы вблизи АФМ-вектора \mathbf{Q} , и поэтому мы можем ввести эффективную частоту ω_s и эффективное затухание η_s спиновых возбуждений вблизи \mathbf{Q} :

$$\chi_s(\mathbf{q}, \omega) \approx \chi_s(\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}, \omega) = \chi_s(\omega).$$

В этом приближении спектральную плотность спиновых возбуждений (11) будем описывать моделью

$$\chi_s''(\omega) = \text{Im } \chi_s(\omega) = \omega_s \frac{\omega \eta_s}{(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + (\omega \eta_s)^2}, \quad (12)$$

где частота возбуждений $\omega_{\mathbf{Q}}$ за счет щели в спектре зависит от АФМ корреляционной длины ξ и увеличивается с уменьшением ξ : $\omega_s = \beta(\xi)J$, где $\beta(\xi)$ — подгоночный параметр. При расчетах мы рассмотрим два характерных значения корреляционной длины: $\xi = 15$ при низкой концентрации носителей вблизи АФМ-состояния ($x = 0.14, 0.15$) и $\xi = 5.5$ для высокой концентраций носителей ($x = 0.18, 0.20$), учитывая экспериментальные данные, приведенные в работах [17, 22, 28–30]. При этих значениях корреляционной длины мы принимаем значения $\beta(\xi = 15) = 0.55$ и $\beta(\xi = 5.5) = 0.91$. Для затухания спиновых возбуждений примем величину $\eta_s = 0.4\omega_s$, которая определяет спектр возбуждений с сильным затуханием, обычно наблюдаемым в допированной парамагнитной фазе [20, 43].

Максимальное значение статической спиновой восприимчивости (10) χ_Q/κ^2 при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ определяет константу взаимодействия электронов со спиновыми возбуждениями, которая находится из условий нормировки для полной восприимчивости:

$$\begin{aligned} \langle\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle\rangle &= \frac{1}{N} \sum_i \langle\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\exp(\omega/T) - 1} \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \right] \langle\langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} | \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\exp(\omega/T) - 1} \chi_s''(\omega) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \chi_s(\mathbf{q}) \equiv \\ &\equiv I(T) \chi_Q I(\kappa), \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь введены нормировочные интегралы

$$I(T) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \text{cth} \frac{\omega}{2T} \chi_s''(\omega), \quad (14)$$

$$I(\kappa) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\kappa^2 + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}. \quad (15)$$

Следовательно, постоянная χ_Q определяется соотношением

$$\chi_Q = \frac{1}{I(T)I(\kappa)} \langle\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle\rangle = \frac{3(1-x)}{4I(T)I(\kappa)}, \quad (16)$$

где $\langle S_i^2 \rangle = (3/4)(1-x)$ и x — концентрация допированных электронов. Нормировочные интегралы достаточно слабо зависят от параметров в представляющей интерес областях температуры T и допирования x .

Таким образом, для определения спектра спиновых возбуждений (9) мы используем два параметра в формуле (12) — частоту спиновых возбуждений ω_s (параметр β) и их затухание η_s , зависящие от АФМ корреляционной длины ξ в формуле (10).

4.3. Функция релаксации и электросопротивление

В работе [9] нами была вычислена оптическая проводимость, которая для нулевой частоты определяет статическую проводимость $\sigma(0)$ и электросопротивление ρ :

$$\begin{aligned} \sigma(0) &= \frac{BtN_{eff}}{\Gamma(0)} = \frac{1}{\rho}, \\ \rho &= \frac{\Gamma(0)/t}{BN_{eff}} = \frac{\tilde{\rho}}{B}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\tilde{\rho}$ — безразмерное электросопротивление и параметр $B = \omega_{opl}^2/4\pi t = e^2 n_0 / mt$. Здесь ω_{opl} — плазменная частота при плотности электронов $n_0 = 1/v_0$, v_0 — объем элементарной ячейки. Для соединения Nd_2CuO_4 с параметрами ячейки в плоскости $a = 3.95 \text{ \AA}$ и расстоянием между плоскостями $d = 12.5 \text{ \AA}$ объем $v_0 = (1/2) a^2 d = 94.8 \text{ \AA}^3$ и параметр $B = 4.9 \cdot 10^3 \text{ (Ом·см)}^{-1}$. Для измеряемого электросопротивления получаем $\rho = \tilde{\rho}/B = 2 \cdot 10^{-4} \tilde{\rho} \text{ Ом·см}$.

Безразмерное электросопротивление $\tilde{\rho}$ в формуле (17) зависит от эффективной плотности носителей заряда в плоскости, $N_{eff}(x)$, и статической скорости релаксации $\Gamma(0)$ (обратного времени свободного пробега, $1/\tau$). Согласно работе [9], эти величины определяются формулами

$$N_{eff}(x) = \eta K(x) = \frac{m}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 t(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} \langle \tilde{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} K(x) &= -\frac{Q}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \tilde{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle \left[\cos(ak_x) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{t'}{t} \cos(ak_x) \cos(ak_y) + 4 \frac{t''}{t} \cos(2ak_x) \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь безразмерный коэффициент $\eta = 2ma^2t$ для решетки с параметром $a = 3.95 \text{ \AA}$ равен $\eta = 1.39$ для $t = 0.35 \text{ эВ}$.

Скорость релаксации $\Gamma(0)$ определяется рассеянием электрона с возбуждением пары частица–дырка с сопутствующим спиновым возбуждением. В приближении взаимодействующих мод она описывается формулой [9]

$$\begin{aligned} \Gamma(0) &= \frac{\pi t}{TK(x)} \frac{t^2 Q^2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \tilde{g}_x^2(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 d\omega' n(\omega_1) [1 - n(\omega_2)] N(\omega') \chi_s''(\mathbf{q}, \omega') \times \\ &\times A(\mathbf{k}, \omega_1) A(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_2) \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega'), \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$n(\omega) = \left(e^{\omega/T} + 1 \right)^{-1}, \quad N(\omega) = \left(e^{\omega/T} - 1 \right)^{-1}$$

и $A(\mathbf{k}, \omega)$ — спектральная плотность электронных возбуждений (см. (25)). Здесь введена безразмерная транспортная вершина

$$\tilde{g}_x(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) = \frac{1}{at^2} g_x(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}),$$

где

$$\begin{aligned} g_x(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) &= v_x(\mathbf{k}) t(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - v_x(\mathbf{k} - \mathbf{q}) t(\mathbf{k}) - \\ &- J(\mathbf{q})/2 [v_x(\mathbf{k}) - v_x(\mathbf{k} - \mathbf{q})], \end{aligned} \quad (21)$$

$v_x(\mathbf{k}) = -\partial t(\mathbf{k})/\partial k_x$ — скорость электрона.

Интегрирование по ω' для спиновой восприимчивости (12) приводит к уравнению

$$\begin{aligned} \Gamma(0) &= \frac{\pi t}{TK(x)} \frac{t^2 Q^2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \tilde{g}_x^2(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \chi_s(\mathbf{q}) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \chi_s''(\omega_2 - \omega_1) n(\omega_1) \times \\ &\times [1 - n(\omega_2)] N(\omega_2 - \omega_1) A(\mathbf{k}, \omega_1) A(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_2). \end{aligned} \quad (22)$$

При вычислении электросопротивления ρ (17) мы используем формулу для скорости релаксации (22). Рассматриваются случаи низкой ($x = 0.14, 0.15$) и повышенной ($x = 0.18, 0.20$) концентраций электронов. С ростом концентрации электронов АФМ корреляционная длина уменьшается: в первом случае она была принята равной $\xi = 15$, а во втором случае, равной $\xi = 5.5$. Используя эти данные, на рис. 3 мы приводим температурные зависимости электросопротивления для этих значений концентрации носителей в логарифмическом масштабе. Экспериментальные данные работы [8] представлены символами. Теоретические кривые $\rho(T) \propto T^2$

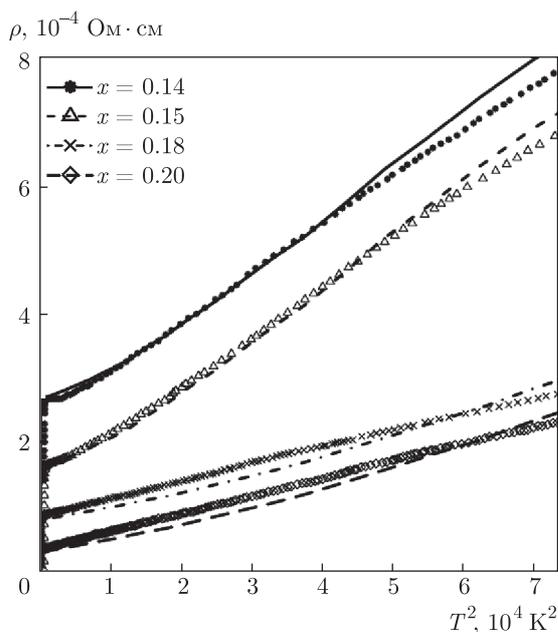


Рис. 3. Температурные зависимости электросопротивления в логарифмическом масштабе. Символы — эксперимент (обозначения те же, что и на рис. 1), сплошная, штрихпунктирная и штриховые линии — теория

смещены вверх на величину остаточного электросопротивления ρ_0 , приведенного в эксперименте.

Отметим, что скорость релаксации существенным образом зависит от АФМ корреляционной длины ξ , которая определяет величину статической спиновой восприимчивости $\chi_s(\mathbf{q})$ в уравнении (10). Она имеет максимум при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, и поэтому основной вклад в скорость релаксации (22) дает произведение спектральных плотностей для основной зоны, $A(\mathbf{k}, \omega_1)$, и теневой зоны, $A(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega_2)$. При больших значениях АФМ корреляционной длины ξ теневая зона имеет высокую интенсивность, и поэтому это произведение дает большой вклад в скорость релаксации. С уменьшением ξ интенсивность теневой зоны падает и скорость релаксации уменьшается. Кроме того, увеличение ξ приводит к росту статической восприимчивости

$$\chi_s(\mathbf{Q}) = \frac{\chi Q}{\kappa^2} \propto \frac{\xi^2}{\ln[1 + 4\pi\xi^2]},$$

которая играет роль константы взаимодействия в выражении (22). Эта зависимость скорости релаксации от АФМ корреляционной длины ξ объясняет значительное уменьшение электросопротивления при увеличении допирования.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена теоретическая интерпретация квадратичной температурной зависимости электросопротивления в электронно-допированных купратах. Как видно из графиков, представленных на рис. 3, электросопротивление имеет явно выраженную квадратичную зависимость от температуры и по величине согласуется с экспериментальными данными. Резкий рост сопротивления — увеличение наклона кривых на рис. 3 при переходе от высокой концентрации электронов $x = 0.18, 0.20$ к пониженной концентрации $x = 0.14, 0.15$, обусловлен прежде всего увеличением АФМ корреляционной длины ξ , как это обсуждалось в конце предыдущего раздела. Незначительная вариация электросопротивления при фиксированном значении ξ объясняется изменением плотности носителей $N_{eff}(x)$ (19). Хорошее согласие теоретических расчетов с экспериментом однозначно указывает на спин-флуктуационный механизм рассеяния электронов в электросопротивлении.

Кулоновское рассеяние электронов также дает квадратичную зависимость электросопротивления от температуры. Однако при кулоновском рассеянии основной вклад вносит рассеяние с малыми волновыми векторами, которые не дают большого вклада в транспортную вершину взаимодействия, в отличие от спин-флуктуационного рассеяния с большой передачей импульса $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}$ в вершине (21). Отметим также, что спин-флуктуационное рассеяние позволяет объяснить и отклонения от квадратичной температурной зависимости электросопротивления, поэтому дополнительный учет вклада электрон-электронного рассеяния для интерпретации экспериментальных данных, принятый в работе [12], представляется излишним.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 19-02-00421, 19-02-00509, 20-02-00015).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Спектр электронных возбуждений

Спектр электронных возбуждений определяется одноэлектронной функцией Грина для операторов (3). Пользуясь методом уравнений движения для двухвременной запаздывающей функции Грина

[5], для фурье-компоненты функции Грина получаем уравнение

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \langle \tilde{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \tilde{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{Q}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \equiv Q G(\mathbf{k}, \omega), \quad (23)$$

где $Q = n/2 = (1+x)/2$ определяет вес двукратно заполненной электронной зоны, $\varepsilon(\mathbf{k})$ — электронный спектр (7) и $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ — массовый оператор. Для массового оператора в приближении непересекающихся диаграмм получаем следующее уравнение [5]:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} dz K(\omega, z | \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) A(\mathbf{q}, z), \quad (24)$$

где спектральная плотность электронных возбуждений

$$A(\mathbf{q}, z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{q}, z). \quad (25)$$

Ядро интегрального уравнения (24) имеет вид

$$K(\omega, z | \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) = |t(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\omega - z - \Omega} \times \frac{1}{2} \left(\text{th} \frac{z}{2T} + \text{cth} \frac{\Omega}{2T} \right) \chi''(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \Omega), \quad (26)$$

где для спектральной плотности спиновых возбуждений используется модель (9):

$$\chi''(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \Omega) = \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \chi_s''(\Omega).$$

Учитывая, что энергия спиновых возбуждений в (26) определяется частотой $\Omega \approx \omega_s$, много меньшей, чем характерная энергия электронных возбуждений $z \sim 4t$, мы можем пренебречь эффектами запаздывания и положить $\Omega = 0$ в знаменателе формулы (26). При этом интеграл по частоте Ω от нечетной функции $\chi_s''(\Omega)$ не дает вклада в член $\text{th}(z/2T)$, и для массового оператора получаем уравнение

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |t(\mathbf{q})|^2 \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{1}{2\pi} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz d\Omega}{\omega - z} A(\mathbf{q}, z) \text{cth} \frac{\Omega}{2T} \chi_s''(\Omega) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |t(\mathbf{q})|^2 \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) I(T) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\omega - z} A(\mathbf{q}, z). \quad (27) \end{aligned}$$

Вводя действительную $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega)$ и мнимую $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$ части массового оператора

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega + i\epsilon) = \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) - i\Sigma''(\mathbf{k}, \omega),$$

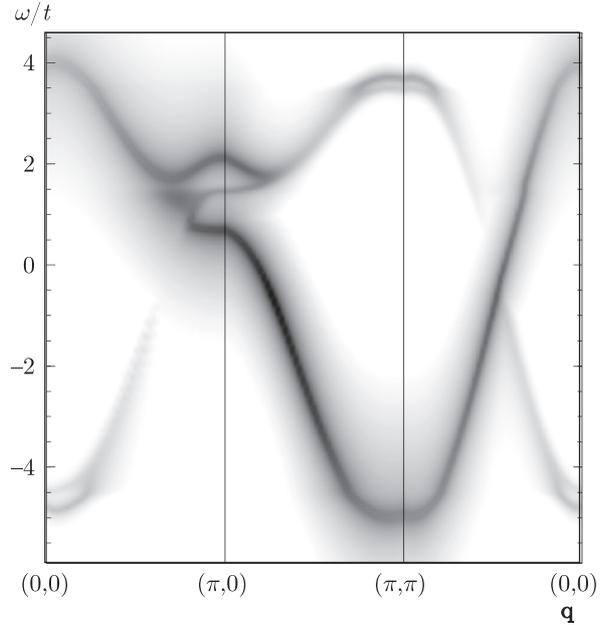


Рис. 4. Спектральная плотность электронных возбуждений (28)

находим выражение для спектральной плотности электронных возбуждений (25):

$$A(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Sigma''(\mathbf{q}, \omega)/\pi}{[\omega - \varepsilon(\mathbf{q}) - \Sigma'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [\Sigma''(\mathbf{q}, \omega)]^2}. \quad (28)$$

Полагая $A(\mathbf{q}, z) = \delta[z - \varepsilon(\mathbf{q})]$, в первом приближении для массового оператора (27) находим

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |t(\mathbf{q})|^2 \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) I(T) \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{q})} = \\ &= \frac{3(1-x)}{4I(\kappa)} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |t(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{\kappa^2 + (\mathbf{Q} - \mathbf{q})^2} \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{q})}, \quad (29) \end{aligned}$$

где были использованы формулы (10) и (16).

Спектральная плотность электронных возбуждений (28) представлена на рис. 4 для симметричных направлений $\Gamma(0,0) \rightarrow X(\pi,0) \rightarrow M(\pi,\pi) \rightarrow \Gamma(0,0)$ для концентрации электронов $x = 0.18$ при значении химического потенциала $\mu = -1$ и для АФМ корреляционной длины $\xi = 5.5$. Хорошо видна дисперсия основной дырочной зоны, представленной кривой с большой интенсивностью с минимумом в точке \mathbf{Q} и максимумом в точке $\Gamma(0,0)$ зоны Бриллюэна. Теневая дырочная дисперсия (shadow band), смещенная на АФМ-вектор \mathbf{Q} относительно основной дырочной зоны представлена кривой с меньшей интенсивностью. Она обусловлена АФМ-корреляциями ближнего порядка и определяется массо-

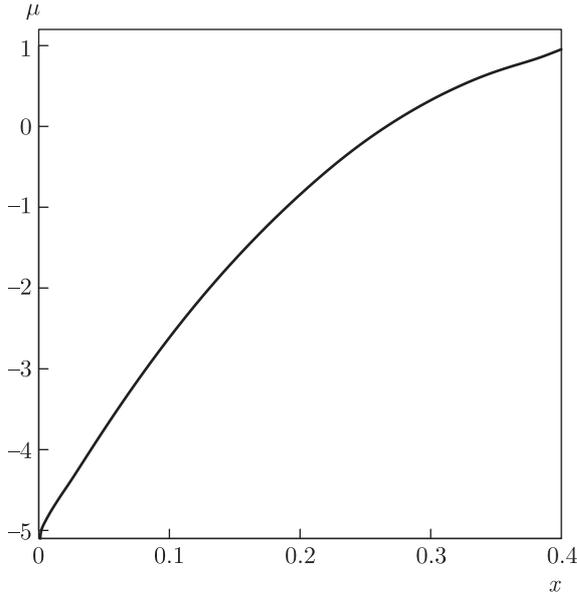


Рис. 5. Химический потенциал μ в зависимости от допирования x

вым оператором (29). На рис. 5 приведена зависимость химического потенциала μ от концентрации допированных электронов x , вычисленной из уравнения (4) для спектральной плотности (28):

$$x = \frac{Q}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \langle \tilde{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1+x}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega A(\mathbf{q}, \omega)}{\exp(\omega/T) + 1}. \quad (30)$$

Как следует из этой формулы, концентрация допированных электронов не превышает $x \leq 1$.

Как обсуждается в разд. 3.3, в ARPES-экспериментах и в экспериментах по изучению квантовых осцилляций с уменьшением допирования наблюдается реконструкция большой дырочной поверхности Ферми, которая преобразуется в малые электронную и две дырочные поверхности Ферми за счет появления щели в электронном спектре. Это преобразование обычно связывают с появлением дальнего АФМ-порядка. Однако подобное изменение поверхности Ферми, может возникать и за счет АФМ-корреляций ближнего порядка, как это обсуждается в теоретической работе [4]. Появление щели в электронном спектре при достаточно большой корреляционной длине ξ при малом допировании в рамках нашего подхода можно описать следующим образом.

Рассмотрим массовый оператор (29) при большой корреляционной длине ξ , когда статическая спиновая восприимчивость $\chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q})$ имеет острый максимум при $(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. В этом случае, полагая $\varepsilon(\mathbf{q}) = \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q})$ в выражении (29), мы можем аппроксимировать массовый оператор функцией

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &\approx \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q})} \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}} |t(\mathbf{q})|^2 \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) I(T) = \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q})} \Delta(\mathbf{k}). \quad (31) \end{aligned}$$

Подставляя это выражение в функцию Грина (23), находим спектр электронных возбуждений, определяемый полюсами этой функции:

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= \frac{1}{2} (\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q})) \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + 4\Delta^2(\mathbf{k})} = \\ &= 4t'\gamma'(\mathbf{k}) + 4t''\gamma''(\mathbf{k}) - \mu \pm \sqrt{[4t\gamma(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2(\mathbf{k})}, \quad (32) \end{aligned}$$

где использована формула (7) для $\varepsilon(\mathbf{k})$. Такой спектр наблюдается в ARPES-экспериментах [35]. В нашем подходе щель $\Delta(\mathbf{k})$ в спектре возникает при пересечении основной зоны и теневой. Величина щели зависит от допирования, в нашей модели — от корреляционной длины ξ . При малой величине ξ теневая зона имеет малую интенсивность и щель в спектре не наблюдается, что приводит к большой поверхности Ферми, определяемой основной зоной.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
2. N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Heidelberg (2010).
3. N. P. Armitage, P. Fournier, and R. L. Greene, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2421 (2010).
4. T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **70**, 174517 (2004).
5. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
6. N. M. Plakida, *Physica C* **531**, 39 (2016).
7. Y. Ando, S. Komiyama, K. Segawa, S. Ono, and Y. Kurita, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 267001 (2004).

8. Н. А. Бабушкина, Л. М. Белова, А. П. Жернов, В. И. Трубицын, А. А. Иванов, О. А. Чуркин, ФНТ **22**, 1260 (1996).
9. А. А. Владимиров, D. Ihle, and N. M. Plakida, Phys. Rev. B **85**, 224536 (2012).
10. А. А. Иванов, S. G. Galkin, A. V. Kuznetsov, and A. P. Menushenkov, Physica C **180**, 69 (1991).
11. N. Tralshawala, J. F. Zasadzinski, L. Coffey, and Quang Huang, Phys. Rev. B **44**, 12102 (1991).
12. A. S. Klepikova, T. B. Charikova, N. G. Shelushinina, M. R. Popov, and A. A. Ivanov, ФНТ **45**, 217 (2019).
13. C. C. Tsuei, A. Gupta, and G. Koren, Physica C **161**, 415 (1989); C. C. Tsuei, Physica A **168**, 238 (1990).
14. M. A. Crusellas, J. Fontcuberta, S. Piñol, T. Grenet, and J. Beille, Physica C **180**, 313 (1991).
15. Y. Dagan, M. M. Qazilbash, C. P. Hill, V. N. Kulkarni, and R. L. Greene, Phys. Rev. Lett. **92**, 167001 (2004).
16. Y. Dagan and R. L. Greene, Phys. Rev. B **76**, 024506 (2007).
17. K. Jin, N. P. Butch, K. Kirshenbaum, J. Paglione, and R. L. Greene, Nature (London) **476**, 73 (2011).
18. F. F. Tafti, F. Laliberte, M. Dion, J. Gaudet, P. Fournier, and Louis Taillefer, Phys. Rev. B **90**, 024519 (2014).
19. E. P. Wohlfarth, in *Ferromagnetic Materials*, Vol. 1, ed. by E. P. Wohlfarth, North-Holland, Amsterdam (1980), p. 121.
20. I. Tomeno, M. Yoshida, K. Ikeda, K. Tai, K. Takamuku, N. Koshizuka, and S. Tanaka, Phys. Rev. B **43**, 3009 (1991).
21. S. Sugai, T. Ido, H. Takagi, S. Uchida, M. Sato, and S. Shamoto, Sol. St. Comm. **16**, 365 (1990).
22. M. Matsuda, Y. Endoch, K. Yamada, H. Kojima, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, and G. Shirane, Phys. Rev. B **45**, 12548 (1992).
23. G. M. Luke, L. P. Le, B. J. Sternlieb, Y. J. Uemura, J. H. Brewer, R. Kadono, R. F. Kiefl, S. R. Kreitzman, T. M. Riseman, C. E. Stronach, M. R. Davis, S. Uchida, H. Takagi, Y. Tokura, Y. Hidaka, T. Murakami, J. Gopalakrishnan, A. W. Sleight, M. A. Subramanian, E. A. Early, J. T. Markert, M. B. Maple, and C. L. Seaman, Phys. Rev. B **42**, 7981 (1990).
24. M. Tranquada, S. M. Heald, A. R. Moodenbaugh, G. Liang, and M. Croft, Nature (London) **337**, 720 (1989).
25. P. K. Mang, O. P. Vajk, A. Arvanitaki, J. W. Lynn, and M. Greven, Phys. Rev. Lett. **93**, 027002 (2004).
26. T. Takahashi, S. Maeda, H. Katayama-Yoshida, Y. Okade, T. Suzuki, A. Fujimori, S. Hosoya, S. Shamoto, and M. Sato, Phys. Rev. B **37**, 9788 (1988).
27. R. J. Birgeneau, D. R. Gable, H. P. Jensen, M. A. Kastner, P. G. Picone, T. R. Thurston, G. Shirane, Y. Endoh, M. Sato, K. Yamatto, Y. Hidaka, M. Oda, Y. Enomoto, M. Suzuki, and T. Murakami, Phys. Rev. B **38**, 6614 (1988).
28. T. R. Thurston, M. Matsuda, K. Kakurai, K. Yamada, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, P. M. Gehring, Y. Hidaka, M. A. Kastner, T. Murakami, and G. Shirane, Phys. Rev. Lett. **65**, 263 (1990).
29. T. Uefuji, K. Kurahashi, M. Fujita, M. Matsuda, and K. Yamada, Physica C **378–381**, 273 (2002).
30. E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik, O. P. Vajk, P. K. Mang, and M. Greven, Nature (London) **445**, 186 (2007).
31. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, D. L. Feng, H. Eisaki, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
32. H. Matsui, T. Takahashi, T. Sato, K. Terashima, H. Ding, T. Uefuji, and K. Yamada, Phys. Rev. B **75**, 224514 (2007).
33. M. Ikeda, T. Yoshida, A. Fujimori, M. Kubota, K. Ono, Hena Das, T. Saha-Dasgupta, K. Unozawa, Y. Kaga, T. Sasagawa, and H. Takagi, Phys. Rev. B **80**, 014510 (2009).
34. A. F. Santander-Syro, M. Ikeda, T. Yoshida, A. Fujimori, K. Ishizaka, M. Okawa, S. Shin, R. L. Greene, and N. Bontemps, Phys. Rev. Lett. **106**, 197002 (2011); Erratum Phys. Rev. Lett. **107**, 079901 (2011).
35. S. R. Park, Y. S. Roh, Y. K. Yoon, C. S. Leem, J. H. Kim, B. J. Kim, H. Koh, H. Eisaki, N. P. Armitage, and C. Kim, Phys. Rev. B **75**, 060501(R) (2007).
36. J. He, C. R. Rotundu, M. S. Scheurer, Yu He, M. Hashimoto, Ke-Jun Xu, Yao Wang, E. W. Huang, Tao Jia, Sudi Chen, B. Moritz, Donghui Lu, Young S. Lee, T. P. Devereaux, and Zhi-Xun Shen, PNAS **116**, 3449 (2019).
37. W. Yu, J. S. Higgins, P. Bach, and R. L. Greene, Phys. Rev. B **76**, 020503(R) (2007).
38. T. Healm, M. V. Kartsovnik, M. Bartkowiak, N. Bittner, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza, and R. Gross, Phys. Rev. Lett. **103**, 157002 (2009).

39. T. Helm, M. V. Kartsovnik, C. Proust, B. Vignolle, C. Putzke, E. Kampert, I. Sheikin, E.-S. Choi, J. S. Brooks, N. Bittner, W. Biberacher, A. Erb, J. Wosnitzer, and R. Gross, *Phys. Rev. B* **92**, 094501 (2015).
40. T. Moriya, Y. Takahashi, and K. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 2905 (1990).
41. D. Ihle and N. M. Plakida, *Physica C* **185–189**, 1637 (1991).
42. D. Ihle and N. M. Plakida, *Z. Phys. B* **96**, 159 (1994).
43. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, *Phys. Rev. B* **80**, 104425 (2009).
44. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, *Phys. Rev. B* **83**, 024411 (2011).
45. Д. Н. Зубарев, *УФН* **71**, 71 (1960).