

Металл–диэлектрик переходы и магнитная восприимчивость в легированных купратных соединениях

С. Джуманов¹, У.Т. Курбанов^{1,2}, З.С. Худайбердиев¹, А.Р. Хафизов¹

¹Институт ядерной физики АН РУз, г. Ташкент, 100214, Узбекистан

²Чирчикский профессиональный колледж промышленности и сферы услуг, г. Чирчик, 111700, Узбекистан

E-mail: dzhumanov@inp.uz;

ulughqurbon@mail.ru

Статья поступила в редакцию 1 мая 2016 г., опубликована онлайн 26 сентября 2016 г.

Приведены результаты теоретического исследования возможности локализации дырочных носителей и металл–диэлектрик переходов, которые проявляются в температурных зависимостях магнитной восприимчивости $\chi(T)$ легированных медно-оксидных (купратных) соединений. Проанализированы критерии металл–диэлектрик переходов, вызванных сильным дырочно-решеточным взаимодействием и образованием предельно узких поляронных зон в этих материалах с уменьшением уровня их легирования x . Показано, что такие металл–диэлектрик переходы в легированных купратах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ происходят в недолегированном режиме (т.е. когда x изменяется от 0,04 до 0,12). Определены характерные температурные зависимости $\chi(T)$ в ВТСП купратах при различных уровнях их легирования. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными по металл–диэлектрик переходам и магнитной восприимчивости в ВТСП купратах.

Приведено результати теоретичного дослідження можливості локалізації діркових носіїв та метал–діелектрик переходів, які проявляються в температурних залежностях магнітної сприйнятливості $\chi(T)$ легированих мідно-оксидних (купратних) сполук. Проаналізовано критерії метал–діелектрик переходів, викликаних сильною дірково-ґратковою взаємодією і утворенням гранично вузьких поляронних зон в цих матеріалах зі зменшенням рівня їх легування x . Показано, що такі метал–діелектрик переходы у легированих купратах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ та $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ відбуваються в недолегированому режимі (тобто коли x змінюється від 0,04 до 0,12). Визначено характерні температурні залежності $\chi(T)$ у ВТНП купратах при різних рівнях їх легування. Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними даними по метал–діелектрик переходам і магнітній сприйнятливості у ВТНП купратах.

PACS: **71.30.+h** Металл–диэлектрик переходы и другие электронные переходы;

74.20.-z Теории и модели сверхпроводящего состояния;

74.25.Na Магнитные свойства, включая вихревые структуры и связанных с ними явлений;

74.72.-h Купратные сверхпроводники.

Ключевые слова: металл–диэлектрик переход; магнитная восприимчивость; ВТСП купраты.

1. Введение

Механизмы локализации носителей заряда и металл–диэлектрик переходы в различных классах твердых тел, в том числе и в легированных медно-оксидных (купратных) высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) — одна из нерешенных задач современной физики конденсированного состояния [1–5]. Изучение этой проблемы становится все более актуальным в свя-

зи с необходимостью решения таких весьма важных для развития энергетики и микроэлектроники и многих других задач, как получение новых перспективных диэлектрических и сверхпроводниковых (СП) материалов. Успешное решение этих проблем во многом зависит от уровня знаний о механизмах локализации и делокализации носителей заряда (электронов и дырок), ответственных за металл–диэлектрик переходы в ок-

сидных соединениях, таких как купратные ВТСП материалы. Экспериментальные и теоретические исследования, проводимые с целью выяснения основных механизмов металл–диэлектрик переходов, многие десятилетия ведутся на всех типах твердых тел [1,2,5–9]. При этом интерес к проблемам локализации носителей и металл–диэлектрик переходов в легированных ВТСП купратах возрастает в связи с бурным развитием и значительными достижениями физики этих новых типов сверхпроводящих материалов, в существенной степени определяющими [2,10–13] основные тенденции развития современной физики вообще и физики твердого тела в частности. По мере изучения ВТСП купратов стало ясно, что они проявляют различное аномальное поведение, причем их электронные свойства сильно изменяются с изменением уровня легирования [2,5,14–24]. В частности, слаболегированные купраты проявляют необычное диэлектрическое поведение. При дальнейшем увеличении уровня легирования купратные соединения становятся необычными металлами, поведение которых сильно отличается от поведения обычных металлов. Высокотемпературная сверхпроводимость появляется в этих материалах при недолегированных, оптимально легированных и сверхлегированных режимах, при которых проявляются наиболее необычные электронные свойства дырочно-легированных купратов. Именно недолегированные и оптимально легированные ВТСП купраты сочетают в себе наиболее интересные диэлектрические, металлические и СП свойства, которые не могут быть объяснены в рамках существующих теорий диэлектриков, металлов и сверхпроводников, основанных на стандартных зонных моделях Вильсона и Мотта–Хаббарда [2,6,25] и на модели сверхпроводимости Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [5,8,15,26]. Предпринимаются многочисленные попытки описать необычные электронные свойства ВТСП купратов в рамках различных теоретических моделей, таких как модель резонирующих валентных связей Андерсона и другие ее варианты, основанные на разделении заряда и спина (см. [15,19]), модели СП флуктуации [27], модели маргинальной ферми-жидкости Вармы [28], почти антиферромагнитной ферми-жидкости (NAFL) Пайнса [29] и модели биполярнонов [4,30]. Большинство из этих теоретических подходов основаны на сильных электронных корреляциях, описываемых моделью Хаббарда и так называемой t - J моделью, которые хорошо применимы лишь для нелегированных купратов, и пренебрегают эффектами трехмерности ВТСП материалов и наиболее важными электрон-фононными взаимодействиями (т.е. поляронными эффектами), присущими легированным полярным материалам. Эти подходы часто приводят к результатам, противоречащим друг другу, и поэтому возникают сомнения в их адекватности и применимости даже к недолегированным купратам [31]. В частности, модель

NAFL описывает лишь линейную зависимость сопротивления. Однако эта модель не описывает отклонение сопротивления от линейной зависимости в псевдощелевом состоянии, а также диэлектрическое поведение сопротивления недолегированных купратов. Предполагается, что многочисленные аномалии электронных свойств ВТСП материалов, наблюдаемые в недолегированных и оптимально легированных режимах, тесно связаны с металл–диэлектрик переходами, разделением фаз и сосуществованием металлических и диэлектрических фаз, причем металл–диэлектрик переходы наблюдаются часто в недолегированных и даже оптимально легированных ВТСП системах и характеризуются переходом к диэлектрическому поведению сопротивления [32–35]. Металл–диэлектрик переходы в легированных купратах проявляются также в температурных зависимостях их магнитной восприимчивости χ . Так что для понимания новых электронных свойств легированных ВТСП материалов прежде всего необходимо выяснить механизмы металл–диэлектрик переходов и разделения металлических и диэлектрических фаз в недолегированных, оптимально легированных и сверхлегированных режимах. Несмотря на значительные теоретические усилия [3,5,11,36], затраченные на изучение металл–диэлектрик переходов и разделения фаз в легированных ВТСП купратах, проявляющихся в их различных электронных свойствах (в частности, магнитной восприимчивости), все еще нет достаточной ясности в понимании этих фундаментальных свойств ВТСП материалов. При этом существующие теоретические модели, как правило, основаны на андерсоновской локализации носителей заряда (см. [2,11]) и на сильных электронных корреляциях, которые играют важную роль лишь в нелегированных купратах [11,12,19,37]. Такие модели игнорируют доминирующую роль сильных электрон-фононных взаимодействий в явлениях локализации носителей заряда и образовании локализованных электронных состояний внутри энергетической щели переноса заряда купратов, а также в металл–диэлектрик переходах [4,5,15,16,30]. Поэтому эти теоретические модели оказались неадекватными для ВТСП материалов и наталкиваются на принципиальные трудности при описании физических процессов в них. Из вышеизложенного следует, что решение проблемы металл–диэлектрик переходов и выяснение природы различных аномалий магнитной восприимчивости легированных ВТСП материалов требует новых теоретических подходов, выходящих за рамки существующих стандартных теорий диэлектриков и металлов, которые оказались неадекватными для этих систем. В настоящей работе нами изучены механизмы металл–диэлектрик переходов и магнитной восприимчивости в ВТСП купратах с различными уровнями их легирования.

2. Механизмы локализации носителей заряда и металл–диэлектрик переходы в легированных купратах

При дырочном легировании купратов свободные дырочные носители, сначала появляющиеся в валентной зоне кислорода, в дальнейшем будут взаимодействовать с акустическими и оптическими колебаниями решетки и автолокализовываться в деформируемой решетке [4,5]. Эти носители заряда в полярных ВТСП купратах будут одеты локальной деформацией решетки и являются поляронами, которые перемещаются вместе со своими деформационными (называемыми также поляризационными) «шубами». Теоретические [4,38,39] и экспериментальные [16,40–42] исследования показывают, что носителями заряда в легированных купратах являются поляроны с эффективными массами $m_p \approx (2-3)m_e$ [16,43] (где m_e — масса свободного электрона). В слаболегированных купратах спаривание поляронов в реальном пространстве приводит к образованию биполяронов. Тогда как куперовское спаривание поляронов происходит при более высоких уровнях легирования, при которых образуются достаточно широкие поляронные зоны. Поэтому в нашей модели мы предполагаем, что основными состояниями дырочных носителей заряда в купратах являются их автолокализованные (т.е. поляронные и биполяронные) состояния, лежащие в энергетической щели переноса зарядов этих материалов, между нижней (ЛНВ) и верхней (УНВ) зонами Хаббарда (рис. 1). В легированных неоднородных купратах сильное электрон-фононное взаимодействие может играть важную роль в локализации носителей заряда и металл–диэлектрик переходах. Дырочно-легированные купраты являются неоднородными системами (где пространственное распределение носителей заряда неоднородно) и недолегированные ВТСП купраты являются более неоднородными, чем сверхлегированные купраты [44]. Можно предполагать, что дырочные носители заряда (т.е. дырочные поляроны) в этих системах сегрегируются в дырочно-насыщенные и дырочно-обедненные области в результате их специфического упорядочения. При этом различные сверхрешетки и энергетические зоны поляронных носителей образуются при их неоднородном пространственном распределении. С уменьшением расстояния между поляронными носителями поляронная зона, лежащая внутри энергетической щели переноса заряда купратов (рис. 1), непрерывно сужается (в дырочно-обедненных областях), и эти носители будут постепенно переходить в локализованные состояния. Это означает, что металлическая проводимость носителей в более широкой поляронной зоне (т.е. в дырочно-насыщенных областях) сменяется прыжковой проводимостью в узкой поляронной зоне и система становится диэлектриком. В данном случае возникает

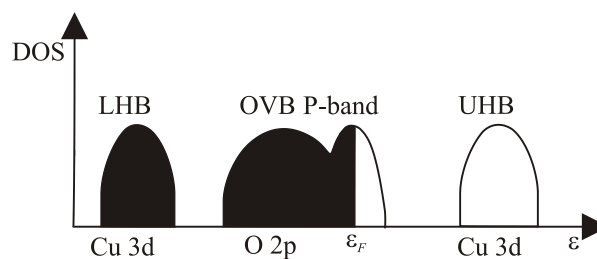


Рис. 1. Схематическая зонная структура (плотность состояний как функция энергии ε) легированных купратов. ЛНВ — нижняя и УНВ — верхняя зоны Хаббарда, P — поляронная зона, ε_F — энергия Ферми поляронной зоны.

важный вопрос, каким образом и при каком уровне легирования ширина зоны поляронов превышает некоторое критическое значение, выше которого поляронный транспорт становится металлическим и легированный купратный материал может испытывать фазовый переход из диэлектрического в металлическое состояние. Условие локализации или делокализации носителей заряда можно определить, используя принцип неопределенности,

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar / 2, \quad (1)$$

где Δp и Δx — неопределенности импульса и координаты носителя соответственно.

Вышеприведенное соотношение неопределенности можно представить в виде [39]

$$\Delta x \Delta E \approx \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m_p} \frac{1}{2\Delta k}, \quad (2)$$

где ΔE и Δk — неопределенности в энергии и волновом векторе носителя. Выражение $\hbar^2 (\Delta k)^2 / 2m_p$ в уравнении (2) представляет неопределенность кинетической энергии поляронов.

С другой стороны, в поляронной зоне неопределенность кинетической энергии носителей заряда порядка энергии Ферми ε_F поляронных носителей, и неопределенность в их волновом векторе составляет около $1/a$ (a — постоянная решетки). Таким образом, соотношение (2) может быть записано в виде

$$\Delta x \Delta E \approx \frac{\varepsilon_F \cdot a}{2}. \quad (3)$$

Неопределенность энергии ΔE большого полярона обозначим E_p , а неопределенность координаты Δx этого носителя будет определяться радиусом большого полярона R_p . Таким образом, условие локализации носителей заряда или металл–диэлектрик перехода может быть записано в виде

$$\frac{E_p}{\varepsilon_F} \gtrsim 0,5 \frac{a}{R_p}. \quad (4)$$

Рассмотрим теперь вопрос о возможности металл–диэлектрик переходов в легированных купратах. Энергия Ферми больших поляронов дается выражением

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m_p}. \quad (5)$$

Согласно уравнения (4), при определенном уровне легирования $n = n_c$ или $x = x_c = n_c/n_a$ (где $n_a = 1/V_a$ — концентрация атомов кристаллической решетки, V_a — объем, приходящийся на формульную единицу CuO_2 в купратах) и $a/R_p \gtrsim 1$, получим следующий критерий металл–диэлектрик перехода:

$$x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left(\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a} \right)^{3/2}. \quad (6)$$

Для простой кубической, объемно-центрированной и гранцентрированной кубической сверхрешеток поляронов с координационными числами $z = 6, 8$ и 12 постоянные решетки могут быть определены соответственно из соотношений $2R = a$ (или $2R_p = a_p$), $2R_p = (\sqrt{3}/2)a$ и $2R_p = (a/\sqrt{2})$. Используя критерии (6) металл–диэлектрик переходов для случаев простой кубической и объемно-центрированной кубической сверхрешетки поляронов, можно записать в виде

$$x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left(\frac{2m_p E_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} (2m_p E_p)^{3/2}, \quad (7)$$

$$x_{c2} = \frac{1}{\sqrt[4]{3}\pi^2 n_a} \left(\frac{m_p E_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{1}{\sqrt[4]{3}\pi^2 \hbar^3 n_a} (m_p E_p)^{3/2}. \quad (8)$$

Теперь оценим x_{c1} и x_{c2} и будем полагать $m_p \approx 2,5m_e$ для дырочно-легированных купратов. При этом используем рассчитанные значения $E_p \approx (0,124–0,170)$ эВ (при $\varepsilon_\infty = 3,5$ и $\eta = 0,02–0,10$), $E_p \approx (0,074–0,10)$ эВ (при $\varepsilon_\infty = 4,5$ и $\eta = 0,02–0,10$) для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) и $E_p \approx (0,124–0,171)$ эВ (при $\varepsilon_\infty = 3,5$ и $\eta = 0,02–0,10$), $E_p \approx (0,094–0,130)$ эВ (при $\varepsilon_\infty = 4,0$ и $\eta = 0,02–0,10$) для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ (YBCO) [39].

Принимая во внимание, что приблизительные значения V_a в LSCO и YBCO соответственно равны 190 и 100 \AA^3 , получаем $n_a \approx 0,53 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (для LSCO) и $n_a \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (для YBCO). Используя соотношения (7), (8) и приведенные выше значения параметров (m_p , E_p и n_a), находим значения критических концентраций поляронных носителей $x_{c1} \approx 0,068–0,237$ и $x_{c2} \approx 0,054–0,191$ для LSCO и $x_{c1} \approx 0,052–0,127$ и $x_{c2} \approx 0,041–0,102$ для YBCO, при которых происходят металл–диэлектрик переходы в LSCO и YBCO. Полученные нами результаты для x_{c1} и x_{c2} хорошо согласуются с существующими экспериментальными данными по металл–диэлектрик переходам при критических

уровнях легирования $x_c = 0,04–0,135$ купратных соединений LSCO и YBCO [2,32–35,45–48]. Видно, что в неоднородных дырочно-легированных купратах сегрегация носителей в дырочно-насыщенных (металлических) и дырочно-обедненных (диэлектрических) областях и металл–диэлектрик переходы могут происходить в широком диапазоне концентрации дырок, начиная от $x \sim 0,03$ (слаболегированная область) до $x \sim 0,135$ (слегка недолегированная область). Таким образом, полученные нами результаты показывают, что металлические и диэлектрические фазы в этих материалах сосуществуют при значениях легирования, лежащих в интервале $0,041 \leq x \leq 0,135$, и подавление сверхпроводимости будет происходить в недолегированных купратах при магическом значении легирования $x = 1/8 (= 0,125)$ из-за увеличения диэлектрических областей при $x < 0,125$.

3. Магнитная восприимчивость купратов в различных режимах легирования

Легированные ВТСП купраты являются уникальными материалами, проявляющими весьма необычные нормальные свойства в недолегированном, оптимально легированном и даже сверхлегированном режимах [2,5,8,17–19,21,49]. Причины происхождения необычных электронных свойств этих ВТСП систем в их нормальном состоянии были центральными вопросами в изучении экзотических ВТСП материалов за последние десятилетия. Попытки объяснить необычные температурные зависимости сопротивления легированных ВТСП купратов (в частности, аномальное диэлектрическое и металлическое поведение сопротивления) и образование различных псевдощелей выше T_c привели к многочисленным противоречивым предположениям (см. [5,8,50–52]). В этой связи изучение температурных зависимостей магнитной восприимчивости ВТСП купратов $\chi(T)$ при различных уровнях легирования может обеспечить полезной информацией о механизмах металл–диэлектрик переходов и образования псевдощелей в этих материалах. Здесь нами развит теоретический подход к определению температурной зависимости магнитной восприимчивости легированных ВТСП купратов, выходящий за рамки теории обычных металлов. В слаболегированных купратах как дефектные центры, так и поляроны (которые являются продуктами термического распада биполяронов) дают вклад в $\chi(T)$. Поэтому магнитную восприимчивость слаболегированных купратов можно определить из выражения

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \\ &= \frac{\mu_B^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty D(\varepsilon) \frac{\partial f_p^*}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\chi_D(T)$ и $\chi_p^*(T)$ — соответственно вклады дефектных центров и поляронных носителей в $\chi(T)$, $f_p^* = \{\exp[\varepsilon + E_{bB}/k_B T] + 1\}^{-1}$ — функция ферми-распределения для поляронов, μ_B — магнетон Бора, E_{bB} — энергия связи большого биполарона, n_D — концентрация дефектных центров, $D(\varepsilon) = (\sqrt{2}m_p^{3/2}/\pi^2\hbar^3)\sqrt{\varepsilon}$ — плотность состояний поляронов.

Первый член в (9) есть не что иное, как закон Кюри $\chi_D(T) \sim 1/T$ для локализованных носителей. Тогда как вклад термически диссоциирующих биполаронов в $\chi(T)$ будет равен

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{3/2} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} e^x}{(e^{E_{bB}/k_B T} e^x + 1)^2} dx. \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), получаем

$$\chi(T) = \frac{\mu_B^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} e^x}{(e^{E_{bB}/k_B T} e^x + 1)^2} dx \right]. \quad (11)$$

Изменение $\chi(T)$ с температурой показано на рис. 2 и 3. Как видно на рис. 2 и 3, $\chi(T)$ в слаболегированных купратах сначала уменьшается с возрастанием температуры, достигает минимума при некоторой температуре и затем увеличивается в соответствии с экспериментальными температурными зависимостями $\chi(T)$ в слаболегированных образцах LSCO ($x = 0,04-0,05$) [53].

Очевидно, что температурная зависимость χ , описываемая уравнением (11), обусловлена локализацией носителей (или диэлектрическим поведением слаболегированных купратов). Когда концентрации примесных центров и поляронов увеличиваются, локализованные примесные и поляронные состояния образуют соответственно энергетические зоны примесей и поляронов, в которых зонное движение носителей заряда приводит к металлическому поведению проводимости и магнитной восприимчивости выше T_c . Поэтому недолегированные, оптимально легированные и умеренно сверхлегированные ВТСП купраты с вырожденными ферми-газами поляронов становятся необычными металлами, проявляющими псевдощелевое поведение при $T > T_c$. Можно считать, что в необычном металлическом состоянии ВТСП купратов куперовское спаривание поляронов выше T_c будет происходить в поляронной зоне, тогда как дырочные носители в примесной зоне остаются неспаренными.

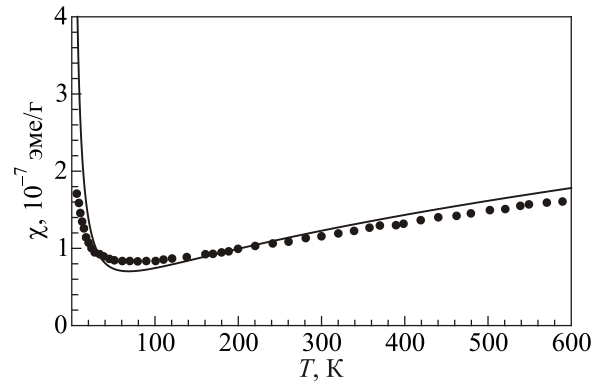


Рис. 2. Температурная зависимость χ в слаболегированных купратах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при $x = 0,04$ с параметрами $m_p = 4,2m_e$, $n_D = 0,18 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\rho = 4,1 \text{ г/см}^3$, $E_{bB} = 0,006 \text{ эВ}$. Теоретические результаты (сплошные кривые) сравнены с экспериментальными данными (•) [53].

При этом прекурсивное куперовское спаривание поляронов и образование поляронных куперовских пар становятся возможными в нормальном состоянии ВТСП купратов ниже некоторой характеристической температуры $T^* (> T_c)$. В недолегированных и оптимально легированных ВТСП купратах неспаренные носители в примесной зоне, термически диссоциированные биполароны и поляронные куперовские пары дают вклад в $\chi(T)$. Поэтому, учитывая вклады дефектных центров χ_D , носителей в примесной зоне χ_I и поляронных компонентов диссоциированных биполаронов χ_p^* и куперовских пар χ_C в магнитную восприимчивость этих ВТСП материалов, полное выражение для $\chi(T)$ можно написать в виде

$$\chi(T) = \chi_D(T) + \chi_I(T) + \chi_p^*(T) + \chi_C(T), \quad (12)$$

где $\chi_D(T) = \mu_B^2 n_D / k_B T$, n_D — концентрация дефектных центров,

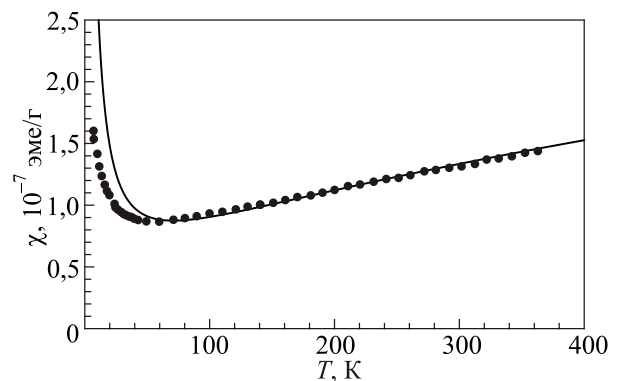


Рис. 3. Температурная зависимость χ в слабо легированных купратах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при $x = 0,05$ с параметрами $m_p = 4,1m_e$, $n_D = 0,18 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\rho = 4,1 \text{ г/см}^3$, $E_{bB} = 0,004 \text{ эВ}$. Теоретические результаты (сплошные кривые) сравнены с экспериментальными данными (•) [53].

$$\chi_I(T) = -2\mu_B^2 \int_0^{\infty} D_I(\varepsilon) \frac{\partial f_I(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (13)$$

$D_I(\varepsilon) = (\sqrt{2}(m_I)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}) / \pi^2 \hbar^3$ и $f_I(\varepsilon) = [e^{(\varepsilon - \varepsilon_{FI})/k_B T} + 1]^{-1}$ соответственно плотность состояний и функция ферми-распределения носителей в примесной зоне, m_I и ε_{FI} — соответственно масса и энергия Ферми носителей в этой зоне,

$$\chi_p^*(T) = -2\mu_B^2 \int_0^{\infty} D_p(\varepsilon) \frac{\partial f_p^*(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (14)$$

$D_p(\varepsilon) = (\sqrt{2}(m_p)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}) / \pi^2 \hbar^3$ — плотность состояний поляронов, $f_p^*(\varepsilon) = [e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1]^{-1}$ — функция ферми-распределения для поляронов, которые появляются при термической диссоциации биполяронов,

$$\chi_C(T) = -2\mu_B^2 \int_0^{\infty} D_c(\varepsilon) \frac{\partial f_c(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (15)$$

$D_c(\varepsilon) = D_p(\varepsilon)/2$ — плотность состояний поляронов с одним спином, введенная в БКШ подобной теории

спаривания [5], $f_c(\varepsilon) = \left[e^{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^{*2}(T)}/k_B T} + 1 \right]^{-1}$ —

функция ферми-распределения для возбужденных поляронных компонент куперовских пар, Δ^* БКШ подобная энергетическая щель (или псевдощель) в спектрах возбуждения поляронных куперовских пар, определяемая из уравнения

$$\Delta^*(T) = 1,76 k_B T^* \tanh(1,85 \sqrt{\frac{T^*}{T}} - 1). \quad (16)$$

Отметим, что основной вклад в $\chi_C(T)$ и БКШ подобное спаривание поляронов вносят поляронные носители, энергии которых близки к энергии Ферми поляронов ε_F . При этом функция $(-\partial f_c(\varepsilon)/\partial \varepsilon)$ ближе к дельта-функции, и поэтому $D_c(\varepsilon)$ можно заменить на $D_c(\varepsilon_F)$. В результате получим

$$\chi_C(T) \approx 2\mu_B^2 D_c(\varepsilon_F(T)) [1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T}]^{-1}, \quad (17)$$

где $\varepsilon_F(T) = \varepsilon_F(0) [1 - (\pi^2/12)(k_B T/\varepsilon_F(0))^2]$ при $\varepsilon_F(0) \gg k_B T$.

Тогда выражение (12) приобретает следующий вид:

$$\chi(T) \approx \mu_B^2 \left\{ \frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{\varepsilon - \varepsilon_{FI}}{k_B T}} \frac{e^{(\varepsilon - \varepsilon_{FI})/k_B T}}{[e^{(\varepsilon - \varepsilon_{FI})/k_B T} + 1]^2} d\varepsilon + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \frac{e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T}}{[e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1]^2} d\varepsilon + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_F(0) - \frac{(\pi k_B T)^2}{12\varepsilon_F(0)}} \right\}. \quad (18)$$

В нормальном состоянии недолегированных и оптимально легированных ВТСП купратов БКШ подобная псевдощель $\Delta^*(T)$ появляется в спектрах возбуждения ВТСП купратов ниже характеристической температуры $T^*(> T_c)$. При высоких температурах $T \gg T^*$ эти ВТСП купраты ведут себя как нормальные металлы и магнитная восприимчивость слабо зависит от температуры. Выше T^* магнитная восприимчивость $\chi(T)$ этих материалов, определяемая из (18), начинает уменьшаться с уменьшением T . Ниже температуры $T^*(> T_c)$ уменьшение $\chi(T)$ с уменьшением T становится более быстрым из-за появления так называемой БКШ подобной псевдощели $\Delta^*(T)$ в спектрах возбуждения ВТСП купратов (см. рис. 4). Для ВТСП материалов $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ плотность и молярная масса соответственно равны $\rho = 6,4 \text{ г/см}^3$ и $M \approx 670 \text{ г/моль}$ [54].

Теперь рассмотрим умеренно сверхлегированные ВТСП купраты, где биполяроны отсутствуют и температура образования БКШ подобной псевдощели T^* будет очень близка к T_c . При этом дефектные центры, носители в примесной зоне и поляронные компоненты

диссоциированных куперовских пар дают вклады в магнитную восприимчивость этих ВТСП материалов и полное выражение для $\chi(T)$ можно написать в виде

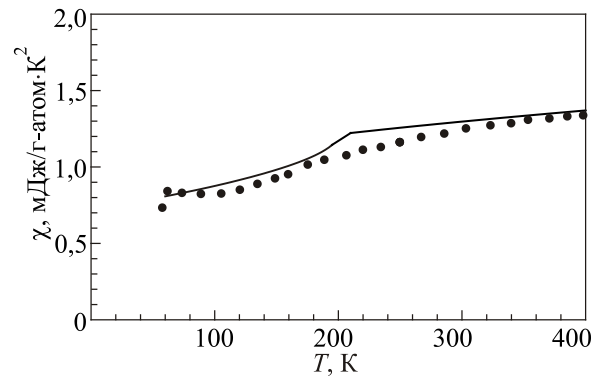


Рис. 4. Сравнение теоретических результатов (сплошные кривые) для магнитной восприимчивости ВТСП купратов $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ с экспериментальными данными при $x = 0,57$ (•) [55] с параметрами $m_p = 2,3m_e$, $m_I = 3,3m_e$, $n_D = 0,01 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon_F(0) = 0,13 \text{ эВ}$, $\varepsilon_{FI} = 0,08 \text{ эВ}$, $E_{bB} = 0,001 \text{ эВ}$.

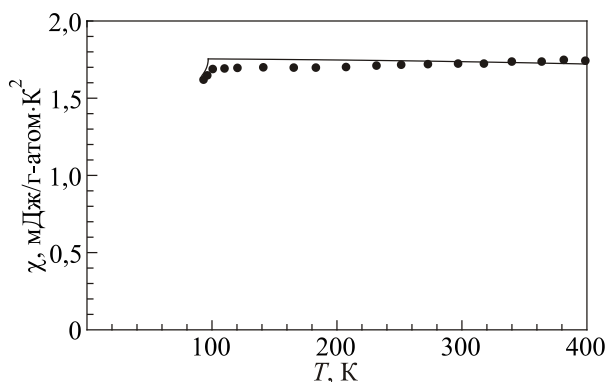


Рис. 5. Сравнение теоретических результатов (сплошные кривые) для магнитной восприимчивости ВТСП купратов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ с экспериментальными данными при $x = 0,97$ (●) [55] с параметрами $m_p = 2,1m_e$, $m_I = 2,8m_e$, $n_D = 0,01 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon_F(0) = 0,24 \text{ эВ}$, $\varepsilon_{FI} = 0,15 \text{ эВ}$.

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \chi_D(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T) = \\ &= \mu_B^2 \left(\frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \sqrt{\varepsilon_{FI}(T)} + \right. \\ &\left. + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_F(0) - \frac{(\pi k_B T)^2}{12\varepsilon_F(0)}} \right). \quad (19) \end{aligned}$$

В этом случае температурная зависимость магнитной восприимчивости умеренно сверхлегированных ВТСП купратов, определяемая выражением (19), будет почти такой же, как в обычных металлах (см. рис. 5). Таким образом, наиболее полно экспериментальные результаты по магнитной восприимчивости ВТСП купратов в их нормальном состоянии описываются изложенной выше теорией, учитывающей возможные вклады носителей в примесной зоне и локализованных на дефектах решетки и вклады поляронных компонент диссоциированных биполяронов и куперовских пар поляронов.

4. Заключение

Исследованы механизмы локализации дырочных носителей и металл–диэлектрик переходов, а также возможности проявления этих явлений в температурной зависимости магнитной восприимчивости χ в легированных купратах. При этом нами предложено адекватное количественное теоретическое описание металл–диэлектрик переходов и необычного поведения $\chi(T)$ в купратных соединениях при различных режимах их легирования $x \approx 0,04-0,20$ с учетом возможности существования различных типов носителей, таких как носители, локализованные на примесных и дефектных центрах, большие биполяроны и поляронные

куперовские пары. Показано, что в LSCO и YBCO металл–диэлектрик переходы, вызванные сильным дырочно–решеточным взаимодействием, реализуются как в слабелегированных ($x \approx 0,03-0,05$), так и в недолегированных ($x \approx 0,05-0,135$) купратах. Далее, определены температурные зависимости магнитной восприимчивости χ слабелегированных купратов, в которых $\chi(T)$ сначала уменьшается с возрастанием температуры по закону Кюри, достигает минимума при некоторой температуре и затем увеличивается в соответствии с экспериментальными температурными зависимостями $\chi(T)$ в LSCO (при $x = 0,04-0,05$). Установлена природа необычного поведения магнитной восприимчивости $\chi(T)$ недолегированных ВТСП купратов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в металлическом состоянии (т.е. выше T_c) и определены законы ее изменения, согласно которым $\chi(T)$ при высоких температурах (т.е. при $T \gg T^*$) слабо зависит от температуры T , но с уменьшением T она уменьшается из-за локализации носителей на дефектных и примесных центрах, а затем ее уменьшение становится более быстрым из-за куперовского спаривания поляронных носителей и появления БКШ подобной псевдощели $\Delta^*(T)$ в спектрах возбуждения ВТСП купратов. Нами также показано, что в умеренно сверхлегированных купратах (где T^* очень близко к T_c) поведения $\chi(T)$ будут такими же, как в нормальных металлах.

Авторы благодарны Э.М. Ибрагимовой, Э.М. Турсуну и Э.Х. Каримбаеву за обсуждение результатов работы. Эта работа поддержана грантом «Ф2–ФА–Ф120» Комитета по координации развития науки и технологий при Кабинете Министров РУз.

1. N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London (1990).
2. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
3. B. Sacépé, T. Dubouchet, C. Chapelier, M. Sanquer, M. Ovadia, D. Shahar, M. Feigel'man, and L. Ioffe, *Nature Phys.* **7**, 239 (2011).
4. D. Emin, *Polarons*, Cambridge University Press, Cambridge (2013).
5. S. Dzhumanov, *Theory of Conventional and Unconventional Superconductivity in the High- T_c Cuprates and Other Systems*, Nova Science Publishers, New York (2013).
6. F. Walz, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, R285 (2002).
7. P.P. Edwards, M.T.J. Lodge, F. Hensel, and R. Redmer, *Phil. Trans. R. Soc. A* **368**, 941 (2010).
8. С.И. Веденеев, *УФН* **182**, 669 (2012).
9. R.V. Vovk, N.R. Vovk, O.V. Shekhovtsov, I.L. Goulatis, and A. Chroneos, *Supercond. Sci. Technol.* **26**, 085017 (2013).
10. V.V. Moshchalkov, *Physica C* **156**, 473 (1988).
11. А.А. Абрикосов, *Physica C* **258**, 53 (1996); *Phys. Usp.* **41**, 605 (1998).
12. A.N. Lavrov and V.F. Gandmakher, *Phys. Usp.* **41**, 223 (1998).

13. H. Okazaki, T. Wakita, T. Muro, T. Nakamura, Y. Muraoka, T. Yokoyama, S.-I. Kurihara, H. Kawarada, T. Oguchi, and Y. Takano, *arxiv:1411.7752v1* [cond-mat.supr-con].
14. Д.Т. Макерт, Я. Даличауч, М.Б. Мейпл, *Редкоземельные и другие замещения в высокотемпературных оксидных сверхпроводниках*, в кн: *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, Д.М. Гинзберг (ред.), Мир, Москва (1990), с. 265.
15. Г.М. Элиашберг, *Электронная структура и физические свойства ВТСП*, в кн: *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, Д.М. Гинзберг (ред.), Мир, Москва (1990), с. 505.
16. M.A. Kastner, R.J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. Endoh, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 897 (1998).
17. J.L. Tallon and J.W. Loram, *Physica C* **349**, 53 (2001).
18. М.В. Садовский, *УФН* **171**, 539 (2001).
19. P.A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
20. Л.А. Боярский, *ФНТ* **32**, 1078 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32** 819 (2006)].
21. A.L. Solovjov and M.A. Tkachenko, *arxiv:1112.3812v* [cond-mat.supr-con].
22. А.Л. Соловьев, В.М. Дмитриев, *ФНТ* **35**, 227 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 169 (2009)].
23. A. Shekhter, B.J. Ramshaw, Ruixing Liang, W.N. Hardy, D.A. Bonn, Fedor F. Balakirev, Ross D. McDonald, Jon B. Betts, Scott C. Riggs, and Albert Migliori, *Nature* **498**, 75 (2013).
24. N. Doiron-Leyraud, S. Lepault, O. Cyr-Choiniere, B. Vignolle, G. Grissonnanche, F. Laliberte, J. Chang, N. Barisic, M.K. Chan, L. Ji, X. Zhao, Y. Li, M. Greven, C. Proust, and L. Taillefer, *Phys. Rev. X* **3**, 021019 (2013).
25. N.F. Mott and E.A. Devis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, Mir, Moscow (1974).
26. Д.М. Гинзберг, *Введение, история открытия и обзор свойств высокотемпературных сверхпроводников*, в кн: *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, Д.М. Гинзберг (ред.), Мир, Москва (1990), с. 8.
27. V.J. Emery and S.A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995).
28. С.М. Варма, *Phys. Rev. B* **55**, 14554 (1997).
29. В.Р. Стожкович и Д.Пинес, *Phys. Rev.* **B55**, 8576 (1997).
30. A.S. Alexandrov, *Theory of superconductivity: from Weak to Strong Coupling*, IoP Publishing, Bristol (2003).
31. В.И. Белявский, Ю.В. Копаев, *УФН* **175**, 191 (2005).
32. S. Ono, Y. Ando, T. Murayama, F.F. Balakirev, J.B. Betts, and G.S. Boebinger, *Physica C* **357–360**, 138 (2001).
33. Y. Ando, S. Ono, X.F. Sun, J. Takeya, F.F. Balakirev, J.B. Betts, and G.S. Boebinger, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 247004 (2004).
34. G.S. Boebinger, Y. Ando, A. Passner, T. Kimura, M. Okuya, J. Shimoyama, K. Kishio, K. Tamasaku, N. Ichikawa, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5417 (1996).
35. Н.В. Анушкова, А.И. Головашкин, Л.Н. Иванова, А.П. Русаков, *ЖЭТФ* **123**, 1188 (2003).
36. S. Dzhumanov and U.T. Kurbanov, *Superlattices and Microstructures* **84**, 66 (2015).
37. J. Zaanen, *cond-mat/0103255*.
38. J.T. Devreese and A.S. Alexandrov, *Rep. Prog. Phys.* **72**, 066501 (2009).
39. S. Dzhumanov, P.J. Baimatov, O.K. Ganiev, Z.S. Khudayberdiev, and B.V. Turimov, *J. Phys. Chem. Solids* **73**, 484 (2012).
40. S. Sugai, *Physica C* **185–189**, 76 (1991).
41. X.X. Bi and P.C. Eklund, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2625 (1993).
42. V.Z. Kresin and S.A. Wolf, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 481 (2009).
43. D.N. Basov and T. Timusk, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 721 (2005).
44. T. Kato, T. Noguchi, R. Saito, T. Machida, and H. Sakata, *Physica C* **460–462**, 880 (2007).
45. J. Fink, N. Nucker, M. Alexander, H. Romberg, M. Knupeer, M. Merkel, P. Adelman, R. Claessen, G. Mante, T. Buslaps, S. Harm, R. Mancke, and M. Skibowski, *Physica C* **185–189**, 45 (1991).
46. B. Nachumi, Y. Fudamoto, A. Keren, K.M. Kojima, M. Larkin, G.M. Luke, J. Merrin, O. Tchernyshyov, Y.J. Uemura, N. Ichikawa, M. Goto, H. Takagi, S. Uchida, M.K. Crawford, E.M. McCarron, D.E. MacLaughlin, and R.H. Heffner, *Phys. Rev. B* **58**, 8760 (1998).
47. S. Komiyama, Y. Ando, X.F. Sun, and A.N. Lavrov, *Phys. Rev. B* **65**, 214535 (2002).
48. M. Hucker, G.D. Gu, J.M. Tranquada, M.V. Zimmermann, H.-H. Klauss, N.J. Curro, M. Braden, and B. Buchner, *Physica C* **460–462**, 170 (2007); S. Strassle, J. Roos, M. Mali, K. Conder, E. Pomjakushina, and H. Keller, *Physica C* **460–462**, 890 (2007).
49. S. Dzhumanov, O.K. Ganiev, and Sh.S. Djumanov, *Physica B* **427**, 22 (2013).
50. S. Dzhumanov, O.K. Ganiev, and Sh.S. Djumanov, *Physica B* **440**, 17 (2014).
51. S. Dzhumanov, E.X. Karimboev, U.T. Kurbanov, O.K. Ganiev, and Sh.S. Djumanov, *Superlattices and Microstructures* **68**, 6 (2014).
52. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, G. Grissonnanche, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D.A. Bonn, W.N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, Louis Taillefer, and Cyril Proust, *Nature* **531**, 210 (2016).
53. T. Nakano, M. Oda, C. Manabe, N. Momono, Y. Miura, and M. Ido, *Phys. Rev. B* **49**, 16000 (1994).
54. <https://ru.wikipedia.org/>.
55. J.W. Loram, K.A. Mirza, J.M. Wade, J.R. Cooper, and W.Y. Liang, *Physica C* **235–240**, 134 (1994).

Metal-insulator transitions and the magnetic susceptibility in doped cuprate compounds

S. Dzhumanov, U.T. Kurbanov, Z.S. Khudayberdiev, and A.R. Hafizov

The results of the theoretical study of the possibility of hole carriers localization and metal-insulator transitions that occur in the temperature dependences of the magnetic susceptibility $\chi(T)$ of doped copper-oxide (cuprate) compounds are presented. The criteria

are analyzed for the metal-insulator transitions caused by a strong hole-lattice interaction and by the formation of very narrow polaron bands in these materials with decreasing the level of doping x . It has been shown that such metal-insulator transitions in doped cuprates $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ occur in the underdoped regime (i.e., when x varies from 0.04 to 0.12). The characteristic temperature dependences $\chi(T)$ are determined in the high- T_c cuprates with different levels of doping. The obtained results are in a good agreement with the experimental data on metal-insulator transitions and the magnetic susceptibility in the high- T_c cuprates.

PACS: **71.30.+h** Metal-insulator transitions and other electronic transitions;

74.20.-z Theories and models of superconducting state;

74.25. Ha Magnetic properties including vortex structures and related phenomena;

74.72.-h Cuprate superconductors.

Keywords: metal-insulator transition; magnetic susceptibility; high- T_c cuprates.