Физика низких температур, 1996, т. 22, № 11, с. 1265–1267

Электронное фазовое расслоение в CuO_2-слое в модели со взаимодействием

Н. А. Немов, В. Р. Белослудов

Институт неорганической химии СО РАН, Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. акад. Лаврентьева, 3

Показано, что учет взаимодействия между дырками в модели Аарони описывает фазовое расслоение в сверхпроводящих лантановых купратах.

Показано, що урахування взаємодії між дірками в моделі Аароні описує фазове розшарування в надпровідних лантанових купратах.

Недопированный La_2CuO_4 является трехмерным диэлектрическим антиферромагнетиком (АФ) ($T_N \approx 250$ K) с электронными конфигурациями, сильно зависящими от степени и способа допирования. При допировании типа замещения двухвалентные ионы Sr или Ba не могут обеспечить нужное количество электронов на месте трехвалентного La. В результате в ВТСП керамике $La_{2-x}(Sr,Ba)_xCuO_{4+\delta}$ возникает дефицит электрона на месте кислорода или дырки в плоскости CuO_2. Другой способ создания дырок в плоскости CuO_2 — введение избыточного кислорода ($\delta > 0$) в междоузлия межплоскостного пространства (между соседними слоями CuO_2). Фазовые диаграммы (T, x) и (T, δ) лантановых купратов, полученные различным способом допирования, сильно отличаются друг от друга. Достаточно полное исследование образцов, синтезированных методом электрохимического окисления [1], показало локализацию дырок в АФ диэлектрической фазе при $x < 0{,}02$ и фазу спинового стекла при $0{,}02 < x < 0{,}08$. В работе [1], как и в других работах (см., например, [2,3]), разделение фаз не наблюдалось. В то же время, при наличии избыточного кислорода фазовая диаграмма $La_2CuO_{4+\delta}$ в области температур $T < 415$ K и $0{,}012 < \delta < 0{,}055$ описывает разделение на фазы с различным содержанием кислорода (или дырок) [1]. Образцы, синтезированные с $0{,}08 < \delta < 0{,}11$ в сверхпроводящем состоянии, также проявляют свойства двухфазной системы с различными значениями δ и критической температуры. Один из вариантов объяснения физической картины этих явлений предложен в работе [4], в которой показано, что возникновение дырки на месте кислорода в плоскости CuO_2 приводит к изменению обменного взаимодействия Cu–Cu с АФ на ферромагнитное (ФМ). Численные расчеты модели Аарони методом Монте-Карло [5,6] показывают тенденцию к кластеризации с формированием областей с высоким содержанием кислорода и описывают фазу типа спинового стекла, но не расслоения.

Оставляя в стороне вопрос об области локализации дырки, рассмотрим простейший вариант модели [4] в случае локализации дырки на связи Cu–O–Cu и учета отталкивательного взаимодействия дырок между собой. Магнитные свойства слоя CuO_2 с учетом выгодности появления в нем дырок (энергия $\varepsilon < 0$) и невыгодности из-за отталкивательного взаимодействия ($U > 0$) описаны гамильтонианом

$$H = \sum J(\sigma_{ij}) S_i S_j + \varepsilon \sum \sigma_{ij} + \frac{U}{2} \sum \sigma_{ik} \sigma_{ij}. \qquad (1)$$

Спиновая переменная атома Cu, расположенного в узле i, перенормирована так, что $S_i = \pm 1$. Суммирование производится по ближайшим соседям, значение $J(\sigma) = J_a(1 - \sigma) - J_f \sigma$, J_a и J_f — положительные константы обменного АФ и ФМ взаимодействий. В соответствии с [4] при наличии дырки на связи Cu–O–Cu между атомами Cu, находящимися в узлах i и j, переменная $\sigma_{ij} = 1$ и возникает взаимодействие ФМ типа, $J(\sigma) = J_f$. Отсутствию дырки соответствует $\sigma_{ij} = 0$ и АФ взаимодействие, $J(\sigma) = J_a$.

Наши уравнения описывают равновесную систему, образовавшуюся в результате синтеза при определенной температуре T_s. В межслоевом пространстве произошла частичная замена La на Sr, Ba и введен дополнительный кислород. Каждый такой

© Н. А. Немов, В. Р. Белослудов, 1996

акт допирования вызывает переход электрона из слоя в межслоевое пространство, и в слое на месте кислорода возникает дырка. Если при температурах ниже T_s количество введенных в межслоевое пространство атомов не изменяется, то число дырок в слое CuO_2 также не изменяется. Далее, отвлекаясь от равновесных свойств примесных атомов, мы будем интересоваться равновесными свойствами слоя CuO_2 в зависимости от магнитных и кулоновских взаимодействий.

Используя метод самосогласованного поля, получаем свободную энергию F в расчете на один атом меди:

$$\beta F = -2K_a(1-n)S^2 + 2K_f nS^2 + \\ + 2\Delta E n + 2un^2 + 2(1-n)\ln(1-n) + \\ + 2n\ln n + \frac{1+S}{2}\ln\frac{1+S}{2} + \frac{1-S}{2}\ln\frac{1-S}{2}. \quad (2)$$

Здесь $\beta = 1/k_BT$, k_B — константа Больцмана, T — температура. Концентрация дырок $n = N_d/2N$ нормирована на число атомов кислорода в плоскости CuO_2; N — количество атомов меди. В случае АФ упорядочения переменная S — среднее значение спина в подрешетках. Другие константы в (2) равны: $K_a = \beta J_a$, $K_f = \beta J_f$, $\Delta E = \beta\varepsilon$ и $u = 2\beta Up$, где p — среднее число дырок, попадающих в область экранирования и эффективно взаимодействующих между собой.

Дифференцируя свободную энергию (2) по спиновой переменной S и концентрации дырок n, получаем систему уравнений

$$S = \text{th}(BS), \quad B = 4[K_a(1-n) - K_f n],$$

$$\ln\left(\frac{1}{n} - 1\right) = (K_a + K_f)S^2 + \Delta E + 2un, \quad (3)$$

описывающих минимумы свободной энергии. Случай $B > 0$ соответствует АФ упорядочению. Если реализуется ФМ упорядочение ($B < 0$), то в выражениях (2), (3) следует заменить K_a, K_f на $-K_a$, $-K_f$.

Анализ выражений (2), (3) показывает, что $F(n)$ может иметь минимумы трех типов: с АФ (левый на рисунке), ФМ (правый) и с неупорядоченной по спинам меди фазой. При изменении температуры в зависимости от параметров J_a, J_f, U и ε возможны фазовые переходы первого рода между этими фазами. На рисунке изображена характерная зависимость свободной энергии βF от концентрации дырок n для $T_1 = 330$ K, $T_2 = 296$ K и $T_3 = 270$ K.

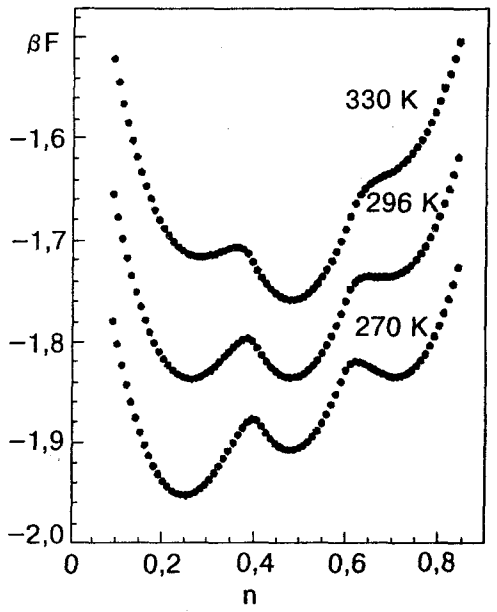

Рис. 1. Зависимость свободной энергии βF от концентрации дырок.

Параметры $\varepsilon = -950$ K, $2Up = 1020$ K, $J_a = J_f = 375$ K (что соответствует $J_a = 1500$ K для правильно нормированного спина) выбраны произвольно для выяснения принципиальной возможности описания фазового расслоения при учете взаимодействия дырок между собой в слое CuO_2. Таким образом, если синтез образца происходит при температурах $T > T_2$, где T_2 — температура совпадения значений двух минимумов $F(n)$, то в области $T < T_2$ выгодным является спиновое упорядочение АФ типа с меньшим значением концентрации дырок. Поскольку полное число дырок в слое определяется только сформированным при синтезе межплоскостным пространством и при понижении температуры не изменяется, образец при $T < T_2$ может представлять собой смесь двух или трех фаз. Другими словами, модель Аарони с учетом взаимодействия дырок между собой способна описать фазовое расслоение в ВТСП, а без учета взаимодействия дает лишь картину спинового стекла.

1. D. C. Johnston, F. Borsa, P. C. Canfield, J. H. Cho, F. C. Chou, L. L. Miller, D. R. Torgeson, D. Vaknin, J. Zarestky, J. Ziolo, J. D. Jorgensen, P. G. Radaelli, A. J. Schultz, J. L. Wagner, S.-W. Cheong, W. R. Bayless, J. E. Schirber, and Z. Fisk, in: *Phase Separation in Cuprate Superconductors*, E. Sigmund and K. A. Müller (eds.), Springer-Verlag, Heidelberg (1994), p. 82.
2. E. Dagoto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
3. Э. Л. Нагаев, *УФН* **165**, 529 (1995).
4. A. Aharoni, R. J. Birgeneau, A. Coniglio, M. A. Kastner, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
5. I. Morgenstern, *Physica* **B163**, 252 (1990).
6. А. Н. Ермилов, *ТМФ* **92**, 344 (1992).

Electronic phase separation in CuO_2 layer in the model with interaction

N. A. Nemov and V. R. Belosludov

It is shown that the interaction between holes taken into account in the Aharony model describes the phase separation in superconducting lanthanum cuprates.