Физика низких температур, 1996, т. 22, № 6, с. 651–654

Подвижность сегнетоэлектрического микродоменного полярона и проводимость ВТСП

В. А. Лыках

Харьковский политехнический университет, физико-технический факультет, Украина, 310002, г. Харьков, ул. Фрунзе, 21

Анизотропия и дискретность полярона, решеточные возбуждения проанализированы как причины действия разных механизмов движения полярона вдоль разных осей кристалла. Обсуждаются температурные зависимости подвижности, эффективной массы полярона и электрической проводимости ВТСП. Рассматривается модель полярона как дырки внутри сегнетоэлектрического домена, имеющего переменные размеры и состоящего из нескольких диполей на цепочечном кислороде.

Анізотропія та дискретність полярона, збудження гратки проаналізовано як причини дії різних механізмів руху полярона уздовж різних осей кристалу. Обговорено температурні залежності рухливості, ефективної маси полярона і електричної провідності ВТНП. Розглянуто модель полярона як дірки всередині сегнетоелектричного домену, який має змінні розміри і складається з декількох диполів на ланцюжковому кисні.

Свойства ВТСП в нормальном и СП состояниях успешно описываются моделями поляронов малого радиуса при сильном электрон-фононном взаимодействии [1] и магнитных поляронов [2]. Во всех ВТСП существуют структурно неустойчивые слои, для 123 — это плоскости цепочек [3]. Смещение ионов кислорода из симметричных позиций цепочек [3] образует диполи, которые могут упорядочиваться в сегнето- или антисегнетоэлектрическую (СЭ, АСЭ) фазы [4]. Дырка в окружении области (домена) СЭ фазы микроскопических размеров, находящейся в АСЭ матрице, названа СЭ микродоменным (СЭМД) поляроном [5]. Его размеры увеличиваются от $2a\times1b$ до $5a\times9b$ постоянных решетки при понижении температуры. В [5] рассмотрены условия локализации дырки в СЭМД, а также условия проявления дискретности его поведения при поглощении ультразвука, при статической и высокочастотной проводимости.

В данной работе обсуждаются возможные механизмы движения СЭМД поляронов в нормальном состоянии, их влияние на зависимость проводимости σ от кристаллографических направлений и температуры T. Вводятся общие соотношения для проводимости, подвижности μ_i, тензора эффективной массы m_i $(i = x, y, z)$, затем их поведение определяется для каждого из механизмов.

Плотность тока [6] для поляронов и дырок имеет вид

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}\ ;\quad \sigma_i = n_q q^2\tau/m_i\ ;\quad \mu_i = \sigma_i/qn_q\ , \qquad (1)$$

где q — заряд носителей; n_q — их концентрация; E — внешнее поле, τ — среднее время между столкновениями. Согласно [7], проводимость определяется в основном цепочками ($\sigma_b/\sigma_a \geq 2$), т.е. система дырок в 123 распадается на две связанные подсистемы: для плоскостей CuO_2 (концентрация n_{pl}) и цепочек (n_{ch}), причем $n_{ch} \ll n_{pl}$. Для невырожденного газа поляронов (малые концентрации) σ определяется в основном изменением $n_q = n_{ch}$ [5]. Ниже рассмотрен вырожденный газ СЭМД поляронов, когда эффективная концентрация носителей $n_{ch\,ef} = n_q \approx \text{const} \ll n_{ch}$ слабо зависит от свойств полярона, и поведение σ обусловлено m_i.

В затравочной блоховской зоне [1,8] кинетическая энергия электрона (дырки) имеет вид

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{+} c_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{nn'}} T_{\mathbf{nn'}}\, c_{\mathbf{n}}^{+} c_{\mathbf{n'}}\ , \qquad (2)$$

где $c_{\mathbf{n}}^{+}$, $c_{\mathbf{n'}}$ ($c_{\mathbf{k}}^{+}$, $c_{\mathbf{k}}$) — операторы рождения и уничтожения дырки на узлах с векторами решетки n, n′ (квазиимпульсами k); $T_{\mathbf{nn'}}$ — неперенормированный матричный элемент перехода с узла n на n′. Анизотропный закон дисперсии и диагональный тензор эффективной массы затравочных дырок:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2\sum_i J_i \cos(a_i k_i)\ ;\quad m_i = \hbar^2/2J_i a_i^2\ , \qquad (3)$$

© В. А. Лыках, 1996

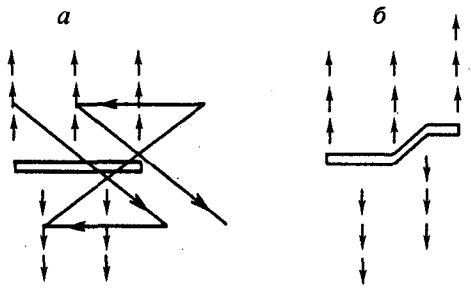

Рис. 1. Вид сегнетоэлектрического микродоменного полярона при низких температурах. Стрелки — переполяризованные в СЭМД диполи (вдоль оси 0x), выстроенные в дипольные ряды, контур — дырочное облако. *а* — Движение параллельно цепочкам. Длинные стрелки указывают последовательное перемещение мест переполяризации диполей (направление переноса энергии решеточными возбуждениями). *б* — Движение (переползание) СЭМД полярона перпендикулярно цепочкам, показано смещение его частей.

где $J_i = T_{\mathbf{n}_i\mathbf{n}_i'} = D_i/2Z_i$ — интеграл перескока (резонансный); D_i — ширина неперенормированной дырочной зоны; Z_i — число соседей в направлении оси i; $a_i = a, b, c$ — периоды решетки. Вероятность туннелирования полярона, согласно [8], равна произведению вероятностей туннелирования дырки ($\sim J_i$) и одновременного перемещения локальной деформации решетки P_{Li}. Отсюда следует экспоненциальное сужение поляронной зоны [1,8]. Любое изменение СЭМД полярона связано с дискретными процессами рождения—уничтожения нескольких диполей или всего СЭМД (см. рис. 1 и [5]) с вероятностью P_{di} и переноса этой энергии возбуждением решетки от одного места переполяризации до другого с вероятностью P_{exi}. Тогда

$$P_{Li} = P_{di}P_{exi}\ ;\quad D_{poli} = D_i P_{Li}\ ;\quad m_{poli} = m_i/P_{Li}\ . \tag{4}$$

Здесь D_{pol}, m_{pol} — перенормированные поляронные ширина зоны и эффективная масса. Если дипольная система термоактивационно преодолевает барьер высотой U_i, то

$$P_{di} = P_{0i}\exp(-U_i/kT)\ . \tag{5}$$

При движении СЭМД полярона вдоль оси c

$$H_{ez} = \sum_{n_z n_z'} T_{n_z n_z'} c^+_{n_z} c_{n_z'} P_{dz} m^+_{n_z} m_{n_z'} \sum_{\omega} P^{\omega}_{exz} b^+_{\omega} b_{\omega}\ , \tag{6}$$

где $m^+_{n_z}$, $m_{n_z'}(b^+_{\omega}, b_{\omega})$ — операторы рождения и уничтожения всего СЭМД (возбуждений решетки). Система диполей должна преодолеть барьер

$$U_z(T) = |W_{MD}| + \Delta \sum_{n=-(n)}^{(n)} (m)_n\ , \tag{7}$$

где $|W_{MD}| \geq 0{,}1$–$0{,}3$ эВ — энергия СЭМД [5]; $\Delta \approx 0{,}06$ эВ — высота барьера двухъямного потенциала для кислорода в цепочках; последняя сумма — полное число переполяризованных диполей в СЭМД; $(m)_n$ — число диполей в дипольном ряду n; (n) — максимальное значение номера ряда СЭМД. Дипольные ряды СЭМД не взаимодействуют между собой в модели [5,9] и направлены перпендикулярно цепочкам. СЭМД растет при охлаждении [5]: $(n) = 0$ при $T \geq 207$–250 K; $(n) = 1$, $n = 0, \pm 1$ при 130–170 K $\leq T \leq$ 220–250 K; $(n) = 2$, $n = 0, \pm 1, \pm 2$ при $T \leq$ 130–170 K. Энергия СЭМД при этом тоже растет (монотонно с учетом отклонения от модели Изинга). Подстановка (7) в (5), (4) и затем в (1) дает сужение зоны и рост массы полярона, т.е. падение подвижности при охлаждении. Рост энергии возбуждений должен увеличить потери, уменьшить P_{exz} и усилить полупроводниковый характер зависимости $\sigma_c(T)$. Падение $\tau(T)$, видимо, не может ее компенсировать. Экспериментальный металлический ход зависимости $\sigma_c(T)$ при больших концентрациях можно объяснить адиабатическим поведением диполей СЭМД при туннелировании дырок через его площадку без переполяризации диполей. Для этого при росте числа дипольных рядов СЭМД необходим рост числа дырок в CuO_2 напротив средней цепочки СЭМД (здесь для дырок максимальна глубина потенциальной ямы [5]). Смена типа проводимости металл—полупроводник, видимо, происходит при концентрациях 1–2 дырки на 5 ячеек (максимальное число рядов СЭМД).

При движении вдоль оси b

$$H_{ey} = \sum_{n_y n_y'} T_{n_y n_y'} c^+_{n_y} c_{n_y'} P_{dy} r^+_{n_y,(n)} r_{n_y',-(n)} P_{exy} b^+_{-(n)} b_{(n)}\ , \tag{8}$$

где $r^+_{n_y,(n)}$, $r_{n_y',-(n)}$ ($b^+_{-(n)}$, $b_{(n)}$) — операторы рождения и уничтожения крайнего дипольного ряда СЭМД (возбуждения кристалла). Процесс движения показан на рис. 1,*а*. Потенциальный барьер имеет вид

$$U_b(T) = |W_{(n)}| + \Delta(m)_{(n)}\ , \tag{9}$$

где энергия крайнего дипольного ряда $|W_{(0)}| \approx$ $\approx 0{,}1$–$0{,}2$ эВ $> |W_{(1)}| \approx 0{,}1$ эВ $\gg |W_{(2)}| \approx 0{,}01$ эВ уменьшается с уменьшением температуры и ростом СЭМД [5], а число диполей в этом ряду

2–4 = $(m)_{(n)}$. Резонансные пики $\sigma_a << \sigma_b$ наблюдались в 123 на основе La на частотах ≈ 1 000, 1 500, 2 000 см$^{-1}$ [10], что соответствует числу переполяризуемых при движении диполей $(m) = 2, 3, 4$ с наибольшим пиком 2 200 см$^{-1}$. Подстановка (9) в (5), (4), (1) дает металлический ход $\sigma_b(T)$, так как быстрое падение энергии дипольного ряда даже на фоне второго члена в (9) может опережать уменьшение T в вероятности (5). В большей степени металлическому поведению проводимости может способствовать увеличение когерентности процессов излучения и поглощения решеточных возбуждений, когда первый член в (9) уменьшается и становится несущественным в сравнении со вторым. Это должно улучшать условия для резонансного движения полярона [8]. Увеличение подвижности достигается ростом P_{exy} в (4) или τ в уравнении (1).

Увеличение размеров СЭМД облегчает создание асимметрии дырочного облака при приложении E_y. Это приводит к асимметрии процессов рождения и уничтожения дипольных рядов по отношению к направлению поля, т.е. с ростом внешнего поля и понижением температуры растут P_{exy}, ширина зоны, подвижность и проводимость.

При движении вдоль оси a

$$H_{ex} = \sum_{n_x n'_x} T_{n_x n'_x} c^+_{n_x} c_{n'_x} \sum_{n=-(n)}^{(n)} P_{dx} P_{exx} \times$$

$$\times (f^+_{n_x,1_n} f_{n'_x,(m)_n} b^+_{n'_x,(m)_n} b_{n_x,1_n}|_{n=2l} + \text{k.c.}|_{n=2l+1}), \quad (10)$$

где $f^+_{n_x,1_n}, f_{n'_x,(m)_n}$ $(b^+_{n'_x,(m)_n}, b_{n_x,1_n})$ — операторы рождения и уничтожения одиночных диполей СЭМД в дипольном ряду n (соответствующих возбуждений). Минимальный барьер для микродомена как целого имеет вид

$$U_x(T) = \sum_{n=-(n)}^{(n)} W_{1_n} + \Delta[2(n) + 1]. \quad (11)$$

Как показано в [5,9], энергия ближайшего к дырке диполя на порядок превышает энергию наиболее удаленного: $W_{1_n} \sim W_{MD} >> W_{(m)_n}$, что ухудшает условия когерентности для возбуждений кристалла и $P_{exx} << P_{exy}$. Оба вклада в (11) растут с понижением температуры, подстановка (11) в (5), (4) дает уменьшение ширины зоны, подвижности и полупроводниковый тип зависимости $\sigma_a(T)$. К металлическому поведению может привести механизм перемещения СЭМД и дырочного облака по частям (рис. 1,*б*), аналогичного, например, переползанию дислокаций [11]. Достаточно флуктуационного смещения параллельно $0x$ одного дипольного ряда с преодолением барьера $W_{1_n} + \Delta$. При понижении T это в 3–5 раз меньше, чем в уравнении (11), растет P_{dx} каждого события и их число, так как увеличивается число рядов микродомена, растут подвижность и проводимость. Асимметрия дырочного облака при «переползании» СЭМД может приводить к дополнительному вкладу в проводимость вдоль цепочек, особенно при локализации дырки на средней цепочке домена и затрудненном туннелировании между его смещенными частями.

Итак, проводимость сегнетоэлектрических микродоменных поляронов определяется их дискретной структурой и неизбежно возникающими возбуждениями решетки. При невырожденном газе СЭМД поляронов полупроводниковый характер σ_{ab} определяется концентрацией поляронов в цепочках, зависящей от энергии СЭ микродомена [5]. Характер σ_c определяется процессом рождение—уничтожение всего микродомена при малых концентрациях (полупроводник) и туннелированием дырок через площадку микродомена без его исчезновения при большой концентрации (металл). Характер σ_b определяется уничтожением и рождением крайнего ряда диполей микродомена; существенны понижение энергии активации, возможность перехода в резонансный режим движения с переизлучением возбуждений решетки, возможность роста под действием поля асимметрии дырочного облака внутри микродомена при понижении T (металл при вырождении). σ_a определяется возможностью «переползания» микродомена и дырочного облака в нем (металл при вырождении), что может повлиять и на увеличение σ_b. Перечисленные механизмы движения СЭМД полярона обеспечивают $\sigma_c << \sigma_a \leq \sigma_b$, наблюдаемые в эксперименте.

1. А. С. Александров, А. Б. Кребс, *УФН* **162**, 1 (1992).
2. W. G. Liang, *Physica* **C162–164**, 197 (1989).
3. M. Francois et al., *Solid State Commun.* **66**, 1117 (1988).
4. В. А. Лыках, *СФХТ* **5**, 1772 (1992).
5. В. А. Лыках, *ФНТ* (в печати).
6. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978).
7. T. A. Friedmann et al., *Phys. Rev.* **B42**, 6217 (1990).
8. Н. С. Зырянов, М. И. Клингер, *Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках*, Наука, Москва (1976).
9. В. А. Лыках, *СФХТ* **7**, 1221 (1994).
10. G. Tanaka et al., *Physica* **C153–155**, 1752 (1988).
11. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).

Mobility of ferroelectronic microdomain polaron and conductivity of HTSC

V. A. Lykakh

Anisotropy and discreteness of a polaron and lattice excitations are analyzed being responsible for by the action of different mechanisms of polaron motion along various crystal axes. Temperature dependencies of polaron mobility and effective mass and electrical conductivity of HTSC are discussed. The polaron model as a hole inside a ferroelectric domain of variable size which consists of several dipoles in oxygen chains is considered.