ЖЭТФ, 2007, том 131, вып. 3, стр. 525–538

СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ СТЕНОК И МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В СЛАБОДОПИРОВАННОМ $La_{2-y}Sr_yCuO_4$

М. Я. Овчинникова [*]

Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук 119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 сентября 2006 г.

В связи с наблюдаемым несоизмеримым спиновым порядком и рядом магнитных эффектов в диэлектрической фазе слабодопированного $La_{2-y}Sr_yCuO_4$ ($y \le 0.05$) проведено теоретическое исследование свойств диагональных страйп-структур модели Хаббарда. В приближении среднего поля исследованы свойства решений с центрированными на связях доменными стенками между антифазными антиферромагнитными доменами. Показано, что для подобных периодических структур с $2l$ узлами в элементарной ячейке, помимо $2(l-1)$ уровней нижней и верхней хаббардовских подзон внутрь хаббардовской щели отделяются 2 уровня, отвечающие квазиодномерным состояниям, локализованным на доменных стенках. Результаты расчетов используются для проверки предположения о том, что в диэлектрической фазе LSCO малая проводимость осуществляется по сетке доменных стенок. Выполнены оценки максимального относительного изменения магнитосопротивления при спин-флоп-переходе при критическом значении магнитного поля и дано качественное объяснение гигантского магнитосопротивления.

PACS: 71.10.Fd, 74.20.Rp, 74.20.-z

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время имеются веские доказательства того, что при низких температурах в ВТСП-купратах заряды и спины CuO_2-плоскостей самоорганизуются в страйп-структуры. В идеальной картине они представляют собой полосы антиферромагнитных (AF) доменов, разделенных доменными стенками [1–3]. Такие микроскопически неоднородные состояния ответственны за многие необычные свойства купратов [4–10]. Новые возможности изучения страйп-фаз связаны с созданием и исследованием кристаллографически однодоменных (недвойниковых) монокристаллов [11, 12]. В частности, изучение продольной и поперечной проводимостей σ_{ab}, σ_c выявило мононаправленность страйп-доменов и доменных стенок. Она проявляется во влиянии магнитного поля на страйп-структуру и домены, что следует из измерений магнитной восприимчивости и анизотропии магнитосопротивления в слабо допированном $La_{2-y}Sr_yCuO_4$ (LSCO) при $y \le 0.05$.

Соединение LSCO интересно также тем, что в AF-состоянии спины Cu слегка наклонены из плоскости, так что AF-порядок сопровождается слабым ферромагнитным (weak ferromagnet, WFM) моментом каждой CuO_2-плоскости или ее фрагмента [13–15]. При этом знак WFM-момента плоскости зависит от фазы AF-порядка в ней. В отсутствие магнитного поля WFM-моменты соседних плоскостей противоположно направлены. Слабый ферромагнетизм обязан своим происхождением малым поворотам октаэдров CuO_2-плоскости в ромбической фазе и возникающему антисимметричному обменному взаимодействию Дзялошинского – Мориа [16, 17]. Это взаимодействие определяет многие эффекты в зависимости магнитной восприимчивости от температуры и магнитного поля [13–15]. К таким эффектам относится, в частности, спин-флоп-переход первого рода в поперечном магнитном поле $h_z \ge 5$ Тл, нормальном к CuO_2-плоскости, при котором происходит переворот WFM-моментов соседних плоско-

[*] E-mail: movchin@center.chph.ras.ru

стей от противонаправленных к одинаково направленным вдоль поля. В продольном магнитном поле $h = h_{ab} = h_{\parallel}$ происходит плавное выстраивание WFM-моментов вдоль поля с ростом поля [18–21]. Спин-флоп-переход в поперечном поле сопровождается большим (вплоть до двукратного) ростом магнитопроводимости $\sigma_z(h)$. Для недвойникового кристалла LSCO была обнаружена [11] двухкратная (а не четырехкратная) анизотропия продольного и поперечного магнитосопротивлений ρ_{ab}, ρ_c в зависимости от направления магнитного поля, лежащего в ab-плоскости. В работе [11] высказана гипотеза, что эффект связан с преобразованием границ между антифазными AF-доменами в границы между доменами с одинаковой фазой AF-порядка при сохранении дырок на таких границах. Возможность существования таких границ требует проверки.

Пример сильного влияния относительной фазы AF-порядка двух плоскостей на перескок зарядов между ними был продемонстрирован раньше [22] на бислойной двумерной модели Хаббарда. Бислойное расщепление уровней вблизи границы Ферми оказывалось много больше при синфазном AF-порядке двух плоскостей, чем при антифазном. Результат имеет простое объяснение. Вблизи уровня Ферми (при $|k_x \pm k_y| \sim \pi$) одноэлектронные состояния разлагаются в основном по узельным функциям лишь одной из двух подрешеток. Поэтому бислойное расщепление много больше, когда предпочтительные для данного спина подрешетки в двух слоях совпадают, чем когда они противоположны. Такой эффект должен проявляться в купратах, в которых межслойное взаимодействие связывает узлы одинаковых подрешеток двух слоев. Однако в LSCO положения Cu-узлов соседних CuO_2-плоскостей сдвинуты на вектор $\tau = (1/2, 1/2, 1/2)$ и каждый узел одного слоя связан с узлами обеих подрешеток соседнего слоя. В работе [23] для объяснения гигантского магнитосопротивления в LSCO использовано различие интеграла переноса (или эффективной массы) в двух диагональных направлениях. Такое различие должно иметь место в ромбической фазе LSCO, но оно мало (пропорционально малому углу поворота октаэдров). Поэтому для описания эффекта потребовалось предположить большую длину прыжков l_h в сравнении с радиусом r_l локализации ($l_h/r_l \sim 25$).

В настоящей работе мы предлагаем другое объяснение большой величины магнитосопротивления и иллюстрируем его с помощью модельных расчетов. Оно связано с влиянием диагональных страйп-структур на электронные свойства системы. В реальности такие структуры отвечают сильно анизотропным AF-кластерам конечного размера с доменными стенками, вытянутыми вдоль ромбической оси a^*. Если, следуя работе [11], предположить, что проводимость в LSCO осуществляется по сетке границ доменов, то необходимо учитывать однонаправленность этих доменных стенок вдоль оси a^* и анизотропию самих одномерных зон. Относительная фаза AF-порядка коррелированных соседних слоев фиксирует структуру локализованных на доменных стенках состояний, участвующих в переносе заряда. В зависимости от этой фазы матричный элемент переноса между электронными состояниями на ближайших доменных стенках слоев может меняться более чем на порядок в зависимости от корреляции расположения границ доменов соседних слоев. Модели иллюстрируют чувствительность поперечной проводимости к изменению фазы AF-порядка соседних CuO_2-плоскостей под действием магнитного поля.

Наибольшее магнитосопротивление в LSCO наблюдается в области температур, для которой характерна прыжковая проводимость, обсуждаемая обычно в терминах примесных зон, как в физике полупроводников [24–26]. Мы пытаемся отождествить их с зонами состояний, локализованных на доменных стенках. Эти зоны расположены внутри хаббардовской щели недопированного антиферромагнетика. Как и в полупроводниках, проводимость в LSCO описывается двумя вкладами [27]:

$$\sigma = \sigma_a + \sigma_h, \quad \sigma_a \propto \exp\left\{-\frac{E_a}{kT}\right\}, \quad \sigma_h \propto \exp\left\{-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/4}\right\}. \tag{1}$$

При высоких температурах преобладает активационный вклад, при низких — второй вклад, интерпретируемый как сопровождаемые фононами туннельные прыжки переменной длины (variable range hopping, VRH) между слабо локализованными состояниями. Характерная энергия активации составляет $E_a \sim 10$–40 мэВ, и кроссовер между двумя механизмами имеет место при температуре T_m так называемого спин-стекольного перехода. Согласно стандартной трактовке, активационная проводимость определяется числом дырок в валентной зоне, пропорциональным $\exp\{-E_a/kT\}$, и их подвижностью. При этом под валентной зоной неявно подразумевается нижняя хаббардовская зона (LHB) AF-состояния LSCO. Дисперсия LHB хорошо известна из фотоэмиссионных (ARPES) данных недопированного LSCO. Аналогичные измерения слабодопированного LSCO при допировании $y = 0.01 - 0.03$ [28, 29] обнаружили наряду с LHB возникновение внутри хаббардовской щели зоны с сегментом поверхности Ферми в области $k_x \sim k_y \sim \pi/2$. Как и в недопированных образцах, сама LHB сдвинута мало. Она остается погруженной ниже химического потенциала на величину $\hbar\omega \sim 300$–500 мэВ. Эта величина на порядок больше, чем активационная энергия проводимости E_a в высокотемпературной области. В связи с этим можно предположить, что проводимость обеспечивается зонами внутри хаббардовской щели, отщепившимися от нижней и верхней хаббардовских подзон (LHB и UHB) при образовании доменных стенок. Состояния внутрищелевой зоны могут быть локализованы в состояния с малой энергией связи на неоднородностях потенциала, обеспечивая температурную зависимость (1). Изучение свойств внутрищелевых состояний и оценки относительного изменения проводимости в магнитном поле проводятся на базе упрощенной модели периодических структур с диагональными доменными стенками.

Предварительно в разд. 2 приведен ряд экспериментальных аргументов, указывающих на наличие страйп-структуры LSCO при малом допировании, и пояснена природа спин-флоп-переходов в магнитном поле. В разд. 3 даны результаты расчета электронных свойств диагональных страйп-структур на основе решений в приближении среднего поля (MF) двумерной модели Хаббарда. В разд. 4 обсуждаются подходы к расчету относительного поперечного магнитосопротивления в предположении о том, что проводимость осуществляется по сетке доменных стенок.

2. УКАЗАНИЯ НА СТРАЙП-СТРУКТУРУ В LSCO ПРИ МАЛОМ ДОПИРОВАНИИ И СПИНОВЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Эксперименты по нейтронному рассеянию слабодопированного LSCO [30–33] показали, что при допировании $y \le 0.02$ имеет место сосуществование трехмерного дальнего AF-порядка и состояния спинового стекла (SG) с диагональной модуляцией чередующегося спина. Таким образом, при температуре $T < T_m \sim 50$ K происходит разделение фаз на области с малой и большой концентрациям дырок. При этом период модуляции не зависит от y. При дальнейшем допировании в области $0.02 \le y \le 0.05$ трехмерный AF-порядок исчезает, а диагональная страйп-структура характеризуется параметром несоизмеримости (IC) ϵ, зависящим от допирования $y \le \epsilon(y) \le \sqrt{2}y$. Параметр ϵ определяет положения q магнитных IC-пиков в упругом рассеянии нейтронов. В единицах обратной решетки $(2\pi/a^*, 2\pi/b^*, 2\pi/c^*)$ ромбической системы[1)] положения пиков отвечают $q = (1, \epsilon, 0)_{ortho} = (1/2 \pm \delta, 1/2 \mp \delta, 0)_t$. Главные векторы модуляции спинов и зарядов при этом равны $\tau = (l, l, 0)_t$ и $\tau' = (l/2, l/2, 0)_t$, где $\sqrt{2}l = \epsilon^{-1} = (\sqrt{2}\delta)^{-1}$ — расстояние между диагональными доменными стенками в единицах постоянной решетки $a_0 = r_{\text{Cu-Cu}}$. Периодическая структура имеет $2l$ атомов в элементарной ячейке. Отсюда следует, что на одно звено доменной стенки длиной $\sqrt{2}a_0$ приходится 0.5–0.7 дырок. Это в $\sqrt{2}$ раз меньше, чем оценка, приведенная в [31–33].

Измерения уширения брэгговских пиков для разных плоскостей рассеяния на недвойниковом монокристалле LSCO [33] позволили определить размеры и ориентацию AF-доменов (кластеров), на которые разбивается объем LSCO в SG-состоянии. В [32, 33] для длин спиновых корреляций $\xi_{a^*}, \xi_{b^*}, \xi_{c^*}$ вдоль ромбических осей получены оценки $\xi_{a^*} > 500$ Å; $\xi_{b^*} = 170$–200 Å; $\xi_{c^*} = 8$–11 Å при $y = 0.01$–0.018 и $(\xi_i) = (160, 25, 4.5)$ или $(\xi_i) = (95, 40, 3.1)$ Å соответственно при $y = 0.02$ и $y = 0.24$. Тот факт, что $\xi_{a^*} \ge 3\xi_{b^*}$ позволяет для качественного описания магнитных эффектов опираться на MF-решения двумерной модели Хаббарда с диагональной страйп-структурой, ориентированной вдоль оси $\mathbf{a}^* = (-a_0, a_0, 0)_t$.

Спиновые взаимодействия в LSCO, в частности, спин-флоп-переход во внешнем магнитном поле $\mathbf{h}$, описываются [13–21] следующим спиновым гамильтонианом:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \{(J+\alpha)\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \alpha S_{iz} S_{jz} - \\ - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]\} - g\mu_B \mathbf{h} \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (2)$$

Здесь S_i, S_j — спины соседних узлов, J, α — изотропное обменное взаимодействие и его анизотропия, $\mathbf{d}$ — вектор Дзялошинского – Мориа, параллельный оси a^*, обязанный поворотам октаэдров. Величины взаимодействий, согласно работам [10, 13, 14], составляют $J \sim 116$–128 мэВ, $|d| = 0.7$–0.9 мэВ, $\alpha \sim 0.04$ мэВ. Наибольшее из анизотропных взаи-

[1)] Оси и постоянные решетки ромбической и тетрагональной фаз будем обозначать соответственно a^*, b^*, c^* или a, b, c, а векторы в соответствующих системах координат сопровождать индексами «$ortho$» (orthorombic)) или «t» (teragonal). Индекс «t» иногда опускаем.

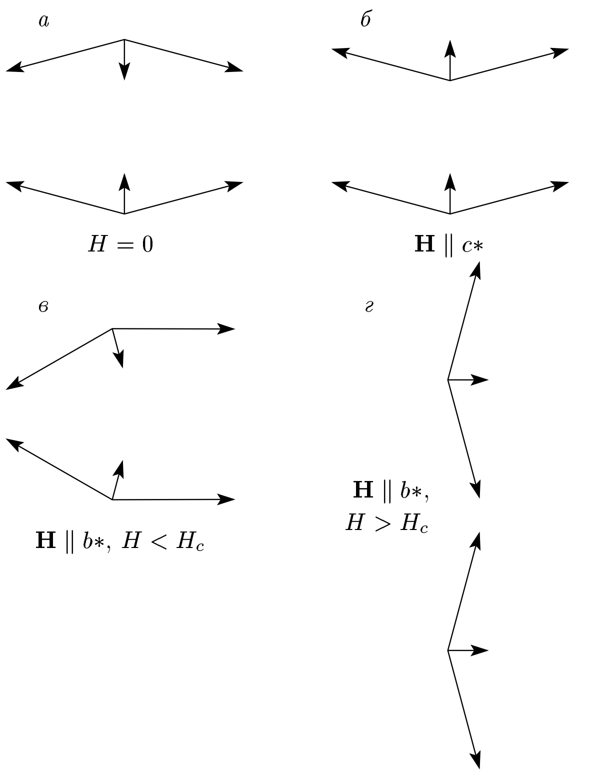

Рис. 1. Векторы чередующегося спина двух подрешеток (большие стрелки) и WFM-моменты узлов (малые стрелки) в соседних слоях LSCO. Схемы отвечают: *а* — нулевому магнитному полю; *б* — поперечному полю, большему критического поля спин-флоп-перехода $h_z > h_c$; *в*, *г* — соответственно слабому и сильному полям, параллельным ромбической оси b^*

модействий — антисимметричный обмен Дзялошинского–Мориа $|d|$ обязывает вектор чередующегося спинового момента лежать в плоскости (b^*c^*), перпендикулярной оси $a^* = (-1, 1, 0)_t$. Дополнительная анизотропия симметричного обмена α фиксирует чередующийся спиновый момент в ab-плоскости. В результате при $h = 0$ спины на двух подрешетках направлены вдоль оси b^* с малым отклонением вектора спина из ab-плоскости на угол $\theta \sim 0.003$ (рис. 1).

При нулевом поле отклонения спинов из плоскости $F_n = \langle S_{zn} \rangle$ одинаковы для всех узлов CuO_2-слоя, складываясь в единый ферромагнитный момент участков слоя, на которых сохраняется фаза AF-порядка. Средняя площадь такого участка $\xi_{a^*}\xi_{b^*}$ определяется длинами спиновых корреляций вдоль ромбических осей. Эффективное межслойное взаимодействие спинов ближайших узлов соседних слоев [23] характеризуется параметром $J_\perp \sim 0.002$ мэВ [10]. Его знак определяет противоположное направление ферромагнитных моментов двух слоев при нулевом магнитном поле. Резкий спин-флоп-переход случается при критическом значении поперечного поля $h = h_z = h_c$, когда энергия WFM-момента в поле превышает вклады от анизотропии симметричного обмена и межслойного спинового обмена [10, 13, 14]. В результате перехода средние WFM-моменты половины слоев, направленные до перехода против поля, переворачиваются, так что WFM-моменты всех слоев выстраиваются по полю (рис. 1). При этом фаза AF-порядка в половине слоев меняет знак.

В случае продольного поля $h \parallel b^*$ имеет место непрерывный переход с плавным поворотом среднего чередующегося спина в плоскости b^*c^* (как результат взаимодействия Дзялошинского–Мориа) и с постепенным выстраиванием WFM-моментов по полю (рис. 1) [10, 12]. Таким образом, направления средних векторов чередующегося спина соседних CuO_2-слоев, вообще говоря, не совпадают, и их относительная ориентация зависит от магнитного поля.

3. СВОЙСТВА ДИАГОНАЛЬНЫХ СТРАЙП-СТРУКТУР

Исследуем MF-решения двумерной модели Хаббарда с периодической диагональной страйп-структурой. Ранее [34–39] исследовались структуры с диагональными доменными стенками, центрированными на Cu-узлах. В данной работе в большей степени рассчитываются структуры с доменными стенками, центрированными на связях (в детальной картине CuO_2-плоскости такие доменные стенки проходят через атомы кислорода). Учтем обнаруженную в работах [32, 33] анизотропию длин корреляций вдоль ромбических осей ($\xi_{a^*} \gg \xi_{b^*} \gg \xi_{c^*}$), т. е. вытянутость AF-кластеров вдоль оси a^*, и будем считать, что доменные стенки параллельны оси a^*. На рис. 2 приведен элемент периодической спиновой структуры с векторами трансляции $\mathbf{E}_1 = (l, l)$ и $\mathbf{E}_2 = (-1, 1)$ и с расстоянием $l/\sqrt{2}$ между доменными стенками, центрированными на связях.

В MF-приближении параметры порядка r_j, S_j определяют средние заряды $2r_j$ и спины узлов элементарной ячейки ($j = 1, \ldots, n_c = 2l$), а волновая функция определяется заселением одноэлектронных собственных состояний $\chi^\dagger_{\tilde{k}\nu}$ линеаризованного гамильтониана [39]:

$$H_{lin} = T + N_L \sum_j 2U\{r_j \hat{r}_j - S_{\alpha j}\hat{S}_{\alpha j}\} = \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \hat{h}_{\tilde{k}}. \quad (3)$$

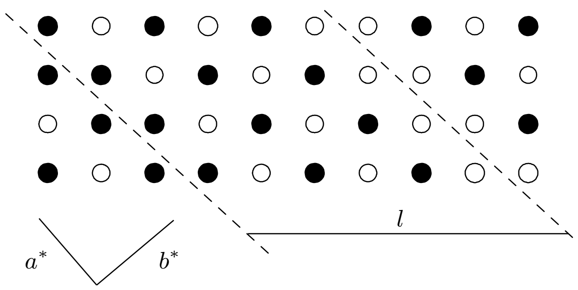

Рис. 2. Спиновая страйп-структура с центрированными на связях доменными стенками (штриховые линии), a^*, b^* — оси ромбической системы. Узлы со спином ↑ (↓) отвечают темным (светлым) кружкам; l — расстояние между доменными стенками вдоль оси x (в единицах a_0). Структура на рисунке отвечает $l = 6$ при реальных значениях $l = 12$–36

Последний разбивается на независимые вклады для каждого значения приведенного квазиимпульса $\tilde{k}$, меняющегося в пределах зоны Бриллюэна периодической структуры $\tilde{G}$. Здесь T — кинетическая энергия, и $\hat{r}_j, \hat{S}_{\mu j}$ — операторы, отвечающие одноэлектронным средним r_j, S_j. В импульсном представлении одноэлектронные собственные состояния гамильтониана (3) разлагаются по набору из $2n_c = 4l$ ферми-операторов:

$$\chi^\dagger_{\tilde{k}\nu} = \sum_{m,\sigma} c^\dagger_{\tilde{k}+Bm,\sigma} W_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}). \qquad (4)$$

Здесь $\nu = 1, \ldots, 2n_c$, $Bm = B_1 m_1 + B_2 m_2$ с векторами трансляции обратной решетки $B_{1(2)}$. Набор целых $m = (m_1, m_2)$ нумерует независимые векторы переброса, а векторы $\tilde{k} + Bm$ охватывают все фазовое пространство G при $\tilde{k} \in \tilde{G}$.

Матрица собственных векторов $W_{m\sigma,\nu}$ и собственные значения $E_{\tilde{k},\nu}$ определяются диагонализацией матрицы $h_{\tilde{k}}$ в базисе $\{c^\dagger_{\tilde{k}+Bm,\sigma}\}$:

$$(h_{\tilde{k}})_{m\sigma,m'\sigma'} W_{m'\sigma',\nu} = W_{m\sigma,\nu} E_{\tilde{k},\nu}, \qquad (5)$$

$$(h_{\tilde{k}})_{m\sigma,m'\sigma'} = \delta_{mm'}\delta_{\sigma\sigma'}\epsilon_{\tilde{k}+Bm} + {} + U\sum_j \varphi(j, m'-m)[r_j\delta_{\sigma\sigma'} - S_{\alpha j}(\sigma_\alpha)_{\sigma\sigma'}]. \qquad (6)$$

Здесь ϵ_k — энергии нулевой зоны при $U = 0$; $\varphi(j, m) = \exp[iBmj]$, и $j = (j_x, j_y)$ перебирает все n_c центров элементарной ячейки. В свою очередь, сами параметры порядка вычисляются через матрицу собственных векторов W и фермиевские функции f согласно формуле

$$\{r_j, S_{\alpha j}\} = \frac{1}{2N}\sum_{\tilde{k}\in\tilde{G}}\sum_{ms,m's'}\{\sigma_0, \sigma_\alpha\}_{ss'}\varphi(j, m'-m) \times \times W^*_{ms,\nu}(\tilde{k}) W_{m's',\nu}(\tilde{k}) f(E_{\tilde{k}\nu} - \mu). \qquad (7)$$

Здесь σ_0, σ_α — соответствующие матрицы Паули. Уравнения (5)–(7) определяют самосогласованные MF-решения периодической структуры.

Важные характеристики — спектральная плотность $A(k, \omega)$ и двумерная плотность состояний $n(\omega)$, относящаяся к площади a_0^2, — в одноэлектронном приближении равны

$$A(k, \omega) = \frac{1}{N} \times \times \sum_{\tilde{k}\in\tilde{G}}\sum_{m,\sigma,\nu}|W_{m\sigma,\nu}(\tilde{k})|^2 \overline{\delta}(E_{\tilde{k}\nu} - \mu - \omega)\delta_{k,\tilde{k}+Bm}, \qquad (8)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\tilde{k}\in\tilde{G}}\sum_\nu \overline{\delta}(E_{\tilde{k}\nu} - \mu - \omega) = = n_c^{-1}\sum_{j,\sigma} n_{j\sigma}(\omega). \qquad (9)$$

При вычислении (8), (9) проводилась стандартная замена δ-функции на функцию с конечной шириной $\Omega \sim 0.04t$.

Кроме $n(\omega)$, интересны также парциальные плотности состояний, т. е. вклады в суммарную плотность состояний (9) от разных узлов $j = (j_x, j_y)$ элементарной ячейки:

$$n_{j\sigma}(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\tilde{k},m,m',\sigma,\nu} e^{iB(m'-m)j} \times \times W^*_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}) W_{m'\sigma,\nu}(\tilde{k}) \overline{\delta}(E_{\tilde{k}\nu} - \mu - \omega). \qquad (10)$$

Они показывают, по каким узлам ячейки преимущественно разлагаются зонные состояния с энергией в данной области спектра ω при данном спине σ.

Наконец, спектральная плотность (8) и функция Ферми $f(\omega)$ определяют интенсивность $I(k, \omega) \sim \sim A(k, \omega) f(\omega)$ фотоэмиссии электронов с проекцией k импульса на плоскость ab и энергией $E = h\nu - \omega$ под действием кванта света $h\nu$. Как и в работе [39], карты $I(k, \omega = 0)$ на плоскости (k_x, k_y) использовались для визуализации поверхности Ферми.

Прежде всего мы убедились, что MF-решений с локализацией заряда на диагональных границах, разделяющих домены с одинаковой фазой AF-порядка, не существует. Для многих испробованных начальных неоднородных зарядовых и спиновых распределений с такими стенками итерационная процедура неизменно приводила к однородному

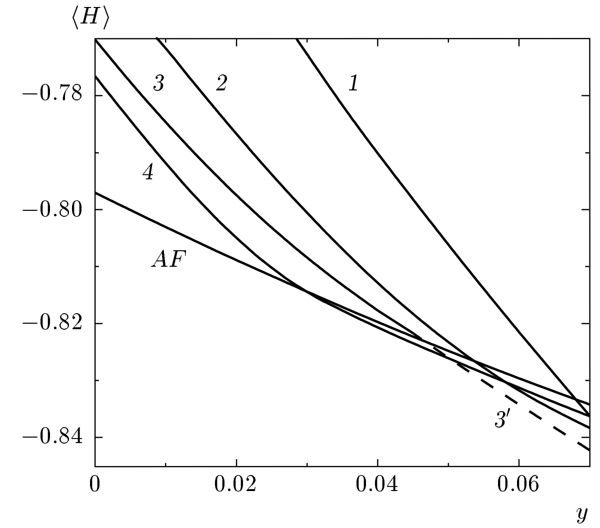

Рис. 3. Зависимости от допирования y средних энергий на один узел диагональных страйп-структур с периодичностью $l\sqrt{2}a_0$ при $l = 10$ (кривые *1, 2*) и $l = 20$ (кривые *3, 4*). Кривые *1, 3* и *2, 4* отвечают структурам с доменными стенками, центрированными соответственно на узлах и на связях. Кривая AF отвечает однородному AF-состоянию. Штриховой участок кривой *3* отвечает плохой сходимости MF-процедуры. Энергии даны в единицах t, параметры модели $U/t = 4$, $t'/t = 0.3$

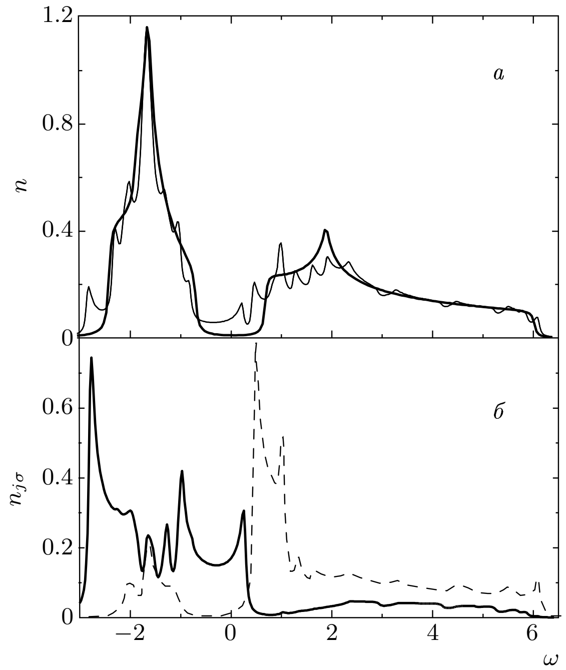

Рис. 4. *а*) Плотность состояний $n(\omega)$, относящаяся к площади a_0^2 для страйп-структуры с $l = 10$ и доменными стенками, центрированными на связях, при допировании $y = 0.03$. *б*) Вклад $n_{j\sigma}(\omega)$ в плотность состояний, рассчитанный по формуле (10), от узла $j = 1$ и спинов $\sigma =\uparrow$ (сплошная кривая) и $\sigma =\downarrow$ (штриховая кривая). Узел $j = 1$ принадлежит доменной стенке со спином $\sigma =\uparrow$. Параметры модели те же, что на рис. 3

AF-состоянию. Этот вывод важен в связи с гипотезой [11] о превращении под действием магнитного поля антифазных соседних доменов в однофазные с сохранением заряженных границ между ними. Речь не идет о границах двойникования или границах кристаллографических доменов с изменением фазы чередующихся наклонов октаэдров, хотя страйпы с участием последних границ обнаружены в работах [40, 41]. Таким образом, MF-расчеты подтверждают заключение, что одномерные диагональные стенки с локализацией заряда на них возможны только на сбоях фазы AF-порядка. Периодические решения с антифазными страйпами удается найти в большой области допирования, включая недопированные модели.

В прежних расчетах [34, 36, 37] диагональных страйп-фаз с $2l$ узлами в элементарной ячейке и с доменными стенками, центрированными на узлах, было установлено, что из $4l$ уровней таких структур $4(l-2)$ нижних (верхних) уровня образуют нижнюю (верхнюю) хаббардовские зоны, LHB (UHB), и 4 вырожденных по спину уровня оказываются внутри хаббардовской щели. Внутрищелевые уровни характеризуются малой дисперсией и отвечают зонам состояний, локализованных на доменных стенках. Аналогичные свойства проявляют и решения с доменными стенками, центрированными на связях. Для них 2 уровня отделяются внутрь хаббардовской щели. На рис. 3 приведены зависимости от допирования энергий некоторых структур для модели с параметрами $U = 4$, $t' = 0.3$ (в единицах t).

На рис. 4 даны плотность состояний $n(\omega)$ (9) и парциальная плотность состояний (10) на узлах, ближайших к доменной стенке, для структуры с $l = 10$ при допировании $y = 0.03$. В данной структуре каждая из доменных стенок, центрированных на связях, характеризуется определенным спином. Поэтому $n_{j\sigma}(\omega)$ зависит от σ. Для четного l стенки с $\sigma =\uparrow (\downarrow)$ чередуются, так что $n_{j\sigma}(\omega) = n_{j+l,-\sigma}(\omega)$. Здесь j нумерует узлы вдоль оси x. При $U/t = 4$, $t'/t = 0.3$ страйп-структуры (в отличие от однородных AF-состояний) имеют отличную от нуля плотность состояний внутри хаббардовской щели. Эта плотность обязана вкладам внутрищелевых уровней

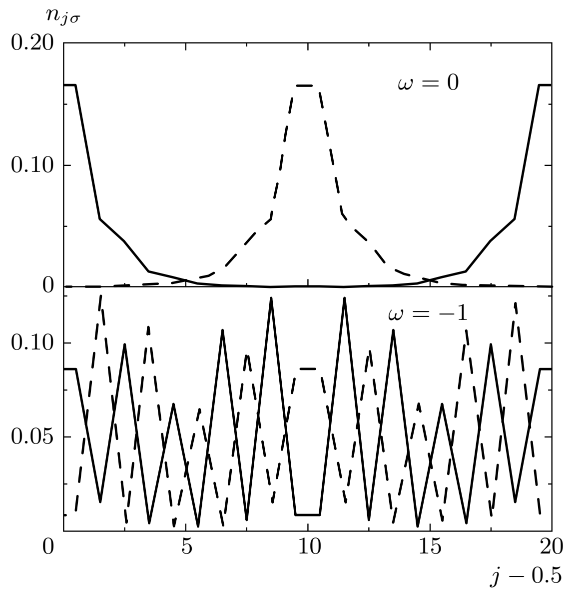

Рис. 5. *а*) Зависимость от номера узла j парциальной плотности состояний $n_{j\sigma}$, уравнение (10), вблизи границы Ферми, $\omega = 0$. *б*) То же вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны при $\omega = -1$ (в единицах $|t|$) для $\sigma = \uparrow$ (сплошные линии) и $\sigma = \downarrow$ (штриховые линии)

и отвечает собственным одноэлектронным состояниям, локализованным на доменных стенках.

На рис. 5 приведены зависимости парциальных плотностей состояний $n_{j\sigma}(\omega)$ от положения узла $j = (j_x, 0)$, $j_x = 1, \ldots, 2l$. Кривые рассчитаны для двух значений $\omega = E_{\tilde{k}\nu} - \mu = 0$ и $\omega = -1.0t$ при допировании $y = 0.03$. При таком y частота $\omega \sim 0$ отвечает зонам внутри хаббардовской щели, а область $\omega \sim -1$ отвечает верхней части LHB. В первой области частот состояния с данным спином разлагаются на ближайших к доменным стенкам узлах в соответствии со спином доменной стенки. В верхней области LHB состояния с определенной проекцией спина разлагаются в основном по узлам только одной из подрешеток в каждом домене. Подобное свойство характерно и для одноэлектронных функций однородного AF-состояния вблизи всей границы магнитной зоны Бриллюэна $|k_x \pm k_y| = \pi$.

Квазиодномерный характер внутрищелевых зон с локализацией дырок на доменной стенке подтверждает и ничтожно малая дисперсия этих зон по координате k_ξ, нормальной к доменной стенке. Энергия соответствующих уровней $E_\nu(k) \equiv E_\nu(k_\eta)$ фактически зависит лишь от k_η. Для структуры с $l = 10$ дисперсия этих уровней по k_ξ (при фиксированном k_η) составляет величину не более $10^{-5}t$. Вырождение зоны по k_ξ означает отсутствие перекрывания состояний, локализованных на разных доменных стенках. Такая «независимость» состояний, локализованных на соседних доменных стенках, подтверждается расчетом периодических структур с неравными площадями соседних доменов с противоположными фазами AF-порядка. Так, были найдены самосогласованные MF-решения периодических структур с вектором трансляции $E_1 = (l, l)$, $l = 10$ по оси ξ, но с чередующимися расстояниями между соседними доменными стенками, равными (по оси x) $l_{1x} = 9$ и $l_{2x} = 11$. Оказалось, что энергия такой структуры совпадает с энергией структуры с равноотстоящими доменными стенками с $l_{1x} = l_{2x} = 10$. На рис. 3 зависимости энергий таких структур от допирования неразличимы. Такая вырожденность структур говорит в пользу того, что при постоянной средней плотности доменной стенки они способны двигаться. По крайней мере при температурах, больших температуры спин-стекольного перехода $T_g \sim 50$ K, можно ожидать, что доменная стенка и страйпы имеют динамический характер. Предположение о подвижности доменной стенки помогает понять, почему спиновая система и средний WFM-момент хорошо описываются [13–15] в приближении среднего поля для спинового гамильтониана (2).

Ранее [38, 39] для диагональных страйп-структур с доменными стенками, центрированными на узлах, было показано, что поверхность Ферми в них существенно анизотропна: сохраняются лишь сегменты поверхности Ферми, нормальные к доменной стенке, пересекающие диагональ $\Gamma(0,0) - Y_{a^*}(-\pi, \pi)$. Аналогичные сегменты поверхности Ферми в направлении другой диагонали $\Gamma - Y_{b^*}$ отсутствуют. По картам интенсивности $I(k, \omega = 0)$ было проверено, что аналогичными свойствами обладают и структуры с доменными стенками, центрированными на связях. Дисперсия зон $E_\nu(k)$ периодических структур подтверждает такую асимметрию.

4. ПОПЕРЕЧНОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ

Наблюдаемое увеличение проводимости при спин-флоп-переходе предполагает влияние на проводимость относительной ориентации спинов соседних слоев. Во всей области допирования, $y \leq 0.05$, поперечная проводимость $\sigma_z(y, T)$ носит прыжковый характер через активационные либо туннельные VRH-перескоки между соседними слоями при высоких либо низких температурах. Согласно рассуждениям Мотта [24–26], в механизме VRH области локализации начальных и конечных состояний достаточно велики, по крайней мере по одной или двум координатам. Следуя гипотезе о проводимости по сетке доменной стенки, можно предположить, что состояния квазиодномерных внутрищелевых зон вблизи границы Ферми претерпевают дополнительную («андерсоновскую») локализацию на неоднородностях потенциала с малой энергией связи. Последняя и определит энергию активации в формуле (1). Поперечная проводимость зависит от 1) матричного элемента межслойного переноса, 2) плотности спектра на границе Ферми и анизотропии поверхности Ферми, 3) времени жизни квазичастиц или длины свободного пробега в каждом слое.

Ограничимся пока идеализированной моделью без учета эффектов андерсоновской локализации и края подвижности [24–26]. Рассмотрим проводимость между двумя слоями с идеальными одинаковыми страйп-структурами и с фиксированным сдвигом Δn_x вдоль оси x структуры доменной стенки второго слоя относительно доменной стенки первого слоя. Элемент беспорядка, обязательный для получения ненулевого сопротивления, вводим стандартным образом [24] через длину свободного пробега l вдоль оси a^* для квазичастиц внутрищелевых зон, т. е. предполагаем, что области когерентности одноэлектронной функции слоя имеют конечный размер l вдоль доменной стенки, и что фазы вкладов разных областей некоррелированы. Такую проводимость, оцененную в пренебрежении случайным потенциалом и андерсоновской локализацией, можно отождествить с минимальной проводимостью у края подвижности (порога протекания).

Вывод выражения для такой минимальной поперечной проводимости σ_z аналогичен выводу формулы Кубо – Гринвуда [24], но вместо предельного перехода $\sigma(\omega) \to \sigma(0)$ по частоте $\omega \to 0$ удобнее использовать малость электрического поля $F = F_z$. Выразим σ_z через разность вероятностей переноса заряда между слоями под действием межслойного взаимодействия:

$$\sigma_z = \frac{e(W_{12} - W_{21})}{FS_{ab}}, \tag{11}$$

$$\sigma_z = e^2 \frac{c}{2a_0^2} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{N} \sum_{\tilde{k}\nu, \tilde{k}'\nu'} |M_{1\tilde{k}\nu, 2\tilde{k}'\nu'}|^2 \times \\ \times \left\{ \frac{1}{e\varphi} [f_1(1 - f_2) - f_2(1 - f_1)] \right\} \delta(E_1 - E_2). \tag{12}$$

Здесь c — постоянная решетки по оси z; $c/2$ и $\varphi = Fc/2$ — расстояние и разность потенциалов между соседними слоями, $S_{ab} = Na_0^2$ — площадь ab-слоя с N узлами, $f_i = f(E_i - \mu_i)$ — функции Ферми, E_i,μ_i — уровни энергии и химические потенциалы слоя i. Матричный элемент межслойного переноса M рассмотрен ниже.

Из признания, что средние плотности зарядов идеальных слоев и их структуры одинаковы, следует, что зонные энергии и химический потенциал второго слоя сдвинуты относительно $E_{1\tilde{k}\nu}$ на величину $e\varphi = eFc/2$. С учетом δ-функции $\delta(E_1 - E_2)$ множитель в скобках $\{\dots\}$ в формуле (12) перепишется в виде

$$\frac{f_1 - f_2}{e\varphi} = \frac{f(E_1 - \mu_1) - f(E_1 - \mu_1 - e\varphi)}{e\varphi} \to \\ \to \frac{f_1(1 - f_1)}{kT}. \tag{13}$$

В результате для проводимости получаем выражение, не зависящее от поля:

$$\sigma_z = e^2 \frac{c}{2a_0^2} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{N} \times \\ \times \sum_{\tilde{k}\tilde{k}'\nu\nu'} |M_{1\tilde{k}\nu, 2\tilde{k}'\nu'}|^2 \frac{f_1(1 - f_1)}{kT} \delta(E_1 - E_2). \tag{14}$$

Учтем следующие обстоятельства. 1) Множитель $f_1(1 - f_1)/kT$ в формуле (14), эквивалентный уширенной (с шириной порядка kT) δ-функции $\delta(E_1 - E_F)$, выделяет уровни вблизи границы Ферми. При малом допировании это внутрищелевые уровни. 2) Фаза коэффициентов в разложении внутрищелевых состояний сохраняется лишь на «длине свободного пробега» l ($l \gg a^*$) вдоль доменной стенки, т. е. вдоль ромбической оси a^*. 3) Энергии внутрищелевых зон $E_{i\nu} = E_{i\nu}(k_\eta)$ зависят лишь от компоненты квазиимпульса k_η вдоль доменной стенки. Отсутствие дисперсии этих зон по k_ξ вдоль оси b^* означает независимость (некоррелированность) фаз состояний, локализованных на разных доменных стенках одного слоя. Это значит, что результат для идеальных периодических структур можно использовать для оценки σ_z для слоев с разупорядоченной системой доменных стенок, так как он отражает свойства состояний, локализованных на одиночных доменных стенках.

Рассмотрим матричный элемент межслойного переноса между зонными состояниями двух слоев с периодическими структурами и сдвигом Δn структуры второго слоя:

$$|M_{1\tilde{k}\nu,2\tilde{k}'\nu'}|^2 = |\langle\chi_{1\tilde{k}\nu}|H_{12}|\chi^\dagger_{2\tilde{k}'\nu'}(\Delta n)\rangle|^2. \quad (15)$$

Здесь H_{12} — оператор межслойного переноса,

$$H_{12} = t_z \sum_{\langle n,n'\rangle,\sigma} \langle c^\dagger_{1n\sigma} c_{2n'\sigma}\rangle = \sum_{\sigma,k\in G} [h_{12}(k) c^\dagger_{1k\sigma} c_{2k\sigma} + \text{H.c.}], \quad (16)$$

$$h_{12}(k) = 4t_z \exp\left[\frac{i(k_x + k_y)}{2}\right] \cos\frac{k_x}{2} \cos\frac{k_y}{2}. \quad (17)$$

Функция $h_{12}(k)$ отражает кристаллическую решетку LSCO и принятый способ нумерации узлов второго слоя, при котором трехмерные координаты Cu-узлов соседних слоев в единицах (a_0, a_0, c_0) терагональной системы равны

$$\begin{aligned} r_{1n} &= (n_x, n_y, 0), \\ r_{2n} &= (n_x, n_y, 0) + (0.5, 0.5, 0.5). \end{aligned} \quad (18)$$

В том случае, когда оба слоя принадлежат одному кристаллографическому домену, углы поворота октаэдров вокруг оси a^* в двух соседних слоях равны $\varphi_{1n} = -\varphi_{2n} = (-1)^n$ при нумерации узлов согласно формулам (18). Это значит, что если AF-порядок в каждом слое имеет «одинаковую» фазу, т. е. $\langle S_{1n}\rangle = \langle S_{2n}\rangle = (-1)^n$, то WFM-моменты слоев противоположно направлены.

Вернемся к собственным состояниям периодических структур в формуле (15). В импульсном пространстве они имеют вид

$$\chi^\dagger_{i\tilde{k}\nu} = \sum_{m\sigma} W^i_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}) c^\dagger_{\tilde{k}+Bm,\sigma}. \quad (19)$$

Ввиду того что межслойное взаимодействие (16) сохраняет квазиимпульс, матричный элемент запишется в виде

$$|M_{\tilde{k}\nu,\tilde{k}'\nu'}(\Delta n)|^2 = \delta^2_{\tilde{k},\tilde{k}'} \left|\sum_{m\sigma} W^{(1)*}_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}) W^{(2)}_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}) h_{12}(\tilde{k} + Bm)\right|^2. \quad (20)$$

Функция $h_{12}(k)$ дается формулой (17). Подставляя (20) в (14) и схематично учитывая конечную «длину свободного пробега» l вдоль доменных стенок квазичастиц внутрищелевых зон (см. Приложение), получим

$$\sigma_z(\Delta n) = \frac{e^2}{a_0} \frac{l}{a_0} \frac{2\pi}{\hbar} \times \sum_\nu \overline{|M_\nu(\Delta n, k_F)|^2} [N^{3D}_\nu(E_F) v_0]^2. \quad (21)$$

Здесь l — длина свободного пробега квазичастиц вдоль доменной стенки. Величина $N^{3D}_\nu(E_F)$ есть трехмерная плотность состояний на границе Ферми для внутрищелевых зон ν, отнесенная к объему $v_0 = a_0^2 c/2$. Она связана с двумерной плотностью состояний $N^{2D}(E_F)$ одного слоя, отнесенной к площади a_0^2, и для диагональных страйп-структур с периодичностью $2l$ может быть оценена как

$$N^{3D}_\nu(E_F) = (c_0/2)^{-1} N^{2D}_\nu(E_F) \sim \frac{2}{\pi l v_0} B^{-1}. \quad (22)$$

Здесь B — ширина внутрищелевой зоны, которая сопоставима с шириной хаббардовской щели порядка $2U\overline{S_z}$ либо $4t'$ в зависимости от типа диагональных страйп-структур. Величина $\overline{|M|^2}$ в формуле (21) — средний вдоль границы Ферми матричный элемент межслойного переноса, вычисляемый по формуле

$$\overline{|M_\nu(\Delta n, k_F)|^2} = \frac{1}{N} \sum_{\tilde{k},\nu,\nu'} |M_{\tilde{k}\nu,\tilde{k},\nu'}|^2 \varphi_{\tilde{k}\nu} \delta_{E_\nu,E_{\nu'}} \times \left[\frac{1}{N}\sum_{\tilde{k},\nu} \varphi_{\tilde{k}\nu}\right]^{-1}, \quad (23)$$

$$\varphi_{\tilde{k}\nu} = \frac{f_{\tilde{k}\nu}(1 - f_{\tilde{k}\nu})}{kT}.$$

Как и в формуле Кубо–Гринвуда [24], проводимость (21) пропорциональна квадрату плотности состояний на уровне Ферми, оцениваемой для диагональных страйп-структур по формуле (22). Оценки абсолютных величин проводимости (21) даны в Приложении.

Для расчета матричного элемента (20) в случае строго периодической структуры необходимо вычислить матрицы коэффициентов $W^i_{m\sigma,\nu}$ в собственных состояниях (19) слоев с учетом сдвига на Δn страйп-структуры второго слоя относительно первого и различия направлений чередующихся спинов соседних слоев. Угол β между этими направлениями зависит от величины и ориентации магнитного поля (см. рис. 1). В результате получим

$$W^{(2)}_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}) = D_{\sigma\sigma'}(\beta) W^{(1)}_{m\sigma',\nu}(\tilde{k}) e^{i(\tilde{k}+Bm)\Delta n}, \quad (24)$$

$$D_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'} \cos\frac{\beta}{2} + \delta_{\sigma,-\sigma'} \sin\frac{\beta}{2} \quad (25)$$

и $W^{(1)}$ находится путем диагонализации матрицы (5). Сдвиг структур Δn определен с точностью до векторов трансляции $E_{1(2)}$. Поэтому без потери общности его можно определить как сдвиг по оси x: $\Delta n = (\Delta n_x, 0)$. Для проводимости по сетке доменной стенки интерес представляют лишь малые (в сравнении с l) сдвиги.

При сдвиге структур на Δn_x согласно уравнению (24) и при $\beta = 0$ спиновая структура стенки сохраняется. Так, для диагональной доменной стенки, центрированной на связях и характеризующейся спином σ, спин сдвинутой стенки 2-го слоя сохраняется. При сдвиге $(\Delta n_x, 0)$ с четным Δn_x сохраняется и фаза большей части каждого AF-домена, доля которой порядка $|l - \Delta n_x|/l$. Состояния (19) с $\Delta n = (\Delta n_x, 0)$ с нечетным Δn_x относятся к структуре, в которой фаза большей части AF-домена меняет знак в сравнении с доменом первого слоя.

В реальной ситуации ожидаем, что изменение доменной структуры происходит путем последовательных смещений доменных стенок с сохранением направлений средних спинов (т. е. фазы AF-порядка) всего домена, кроме узлов в окрестности самой доменной стенки. Внутрищелевые состояния $\chi^{\dagger}_{\nu}(\tilde{k})$, отвечающие смещенным таким образом структурам, будут определяться уравнениями (19), (24), (25), в которых зависимость β от смещения задается функцией $\beta = \beta_{\rm I}(\Delta n)$, одной из определенных ниже:

$$\beta = \beta_{\rm I(II)}(\Delta n) = \pi[1 \mp (-1)^{\Delta n}]/2.0. \qquad (26)$$

Матричный элемент $M\left(\Delta n, \beta_{\rm I}(\Delta n)\right)$ определит вероятность переноса заряда между доменными стенками первого и второго слоев $\mathrm{DW}_1 \to \mathrm{DW}_2$ в ситуации, когда справа и слева от близких стенок $\{\mathrm{DW}_1, \mathrm{DW}_2\}$ двух слоев домены этих слоев имеют одинаковую фазу AF-порядка. Такая ситуация имеет место при магнитном поле $h_z < h_c$, меньшем критического поля спин-флоп-перехода.

При поле $h_z > h_c$ ожидаем, что близкие стенки $\{\mathrm{DW}_1, \mathrm{DW}_2\}$ разделяют домены, которые имеют противоположную относительную фазу AF-порядка в двух слоях. Им отвечает другая зависимость $\beta = \beta_{\rm II}(\Delta n)$ от угла поворота направления чередующихся спинов второго слоя относительно первого из двух возможных зависимостей, определенных в (26). При $\beta = \beta_{\rm II}(\Delta n)$ WFM-моменты от доменов двух слоев имеют одинаковый знак в основной области их пересечения. Однако этого недостаточно, чтобы суммарный WFM-момент был направлен по полю. Последнее требует также, чтобы различались площади AF-доменов с синхронизованными WFM-моментами по и против магнитного поля. Если считать, что средняя плотность доменных стенок в двух слоях одинакова и их число при фиксированном допировании не меняется, а меняются лишь площади доменов, то суммарный WFM-момент будет пропорционален разности площадей доменов, в которых синхронные фазы AF-порядка двух слоев равны соответственно (+) и (−).

Что касается магнитосопротивления, то для его оценки важно сравнить вероятности переноса заряда между близкими доменными стенками в двух случаях: когда пара близких стенок окружена AF-доменами, фазы которых одинаковы в двух слоях (случай I), либо противоположны (случай II). Эти случаи определяются усредненным матричным элементом (23), в котором угол β поворота чередующихся спинов второго слоя относительно первого зависит от сдвига структуры согласно одной из двух зависимостей (26):

$$\overline{|M_{\rm I(II)}(\Delta n)|^2} = \overline{|M_{\rm I(II)}\left(\Delta n, \beta_{\rm I(II)}(\Delta n)\right)|^2}. \qquad (27)$$

Если предположить коррелированное расположение доменных стенок соседних слоев, описываемое распределением вероятности с параметром w,

$$P(\Delta n, w) = \left(w\sqrt{\pi}\right)^{-1} \exp\left[-\left(\frac{\Delta n}{w}\right)^2\right], \qquad (28)$$

то верхнюю границу отношения γ проводимостей до и после спин-флоп-перехода можно рассчитать по формуле

$$\gamma_{max}(w) = \max\{\sigma_z(h_z < h_c)/\sigma_z(h_z > h_c)\} = L_{\rm I}/L_{\rm II}, \qquad (29)$$

$$L_J = \sum_{\Delta n} P(\Delta n, w)\overline{|M(\Delta n, \beta_J(\Delta n)|^2}. \qquad (30)$$

Здесь величины $|M|^2$ рассчитаны по формулам (20) с каждой из двух зависимостей (26).

На рис. 6 даны зависимости средних квадратов матричных элементов $\overline{|M_{\rm I(II)}|^2}$ как функции сдвига доменных стенок для двух случаев относительного спинового порядка. Рисунок 7 дает зависимость отношения (29) от ширины w распределения вероятностей (28) этих сдвигов в страйп-фазе. Параметр w определяет степень коррелированности положения доменных стенок в соседних слоях. Наибольшая величина $|M|^2$, а следовательно, и максимальная величина межслойного переноса, относятся к малым расстояниям Δn между ближайшими доменными стенками двух слоев. Именно для малых Δn максимальным оказывается отношение $\overline{|M_I|^2}/\overline{|M_{II}^2|}$ вероятности перескока между локализованными на доменных стенках состояниями для двух случаев, I и II,

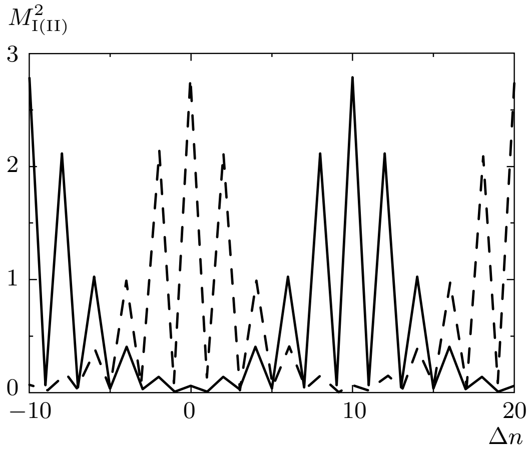

Рис. 6. Усредненные матричные элементы $M^2_{\mathrm{I(II)}}$ перескока между состояниями, локализованными на доменных стенках соседних слоев, как функции сдвига $(\Delta n, 0)$ структур. Последние характеризуются параметром $l = 10$ и центрированными на связях доменными стенками. Два случая I и II (сплошная и штриховая кривые) рассчитаны по формулам (27), (26) и отвечают синфазным или антифазным AF-порядкам основных площадей доменов

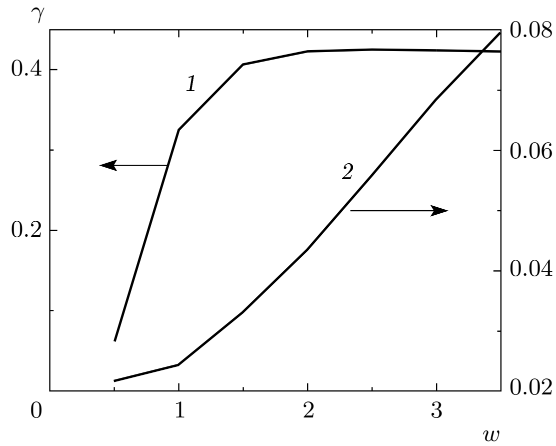

Рис. 7. Зависимости верхней границы отношения γ проводимостей до и после спин-флоп-перехода от ширины w распределения (28) вероятностей сдвигов структур соседних слоев. Кривые $\gamma(w)$ рассчитаны по формуле (29) для структур с доменными стенками, центрированными на узлах (кривая *1*) либо на связях (кривая *2*), и относятся соответственно к левой и правой осям

когда близкие стенки DW_1 и DW_2 разделяют в среднем синфазные или антифазные AF-домены. Соответствующее максимальное отношение (29) проводимостей, усредненных с распределением (28), приведено на рис. 7. Столь большой эффект имеет простое объяснение. Для рассматриваемых страйп-структур с доменными стенками, центрированными на связях, локализованные на DW_1 и DW_2 состояния характеризуются определенными проекциями спинов и переход между ними возможен только при $\sigma_1 = \sigma_2$. Но вероятности совпадения спинов близких доменных стенок двух слоев зависят от средней относительной фазы AF-доменов в них.

Заметим, что для структуры с доменными стенками, центрированными на узлах, на каждой доменной стенке имеются вырожденные по энергии локализованные состояния с $\sigma = \pm 1/2$. Сами стенки (и локализованные на них состояния) различаются лишь разным расположением спинов на них. Уже такого различия оказывается достаточно, чтобы получить скачок проводимости (29) при спин-флоп-переходе для такой структуры (см. рис. 7). Для обеих структур оцененный максимальный эффект превышает наблюдаемое двукратное падение поперечного сопротивления при спин-флоп-переходе [11]. Но проведенная оценка скачка отвечает ситуации, когда до (после) перехода вероятность антифазного AF-порядка соседних слоев близка к 1 (либо к 0). Между тем эти вероятности могут лишь немного отличаться от 1/2 в случае, когда энергия WFM-момента AF-кластера в магнитном поле меньше kT. Тогда $\Delta\sigma(h)/\sigma \ll 1$ и пропорционально $(h/kT)^2$, что и наблюдается при больших температурах [11]. Возможно, для количественного описания как поперечной, так и продольной проводимостей σ_z, σ_{ab} необходим учет динамического характера страйпов и их нерегулярности. Во всяком случае тот факт, что величины σ_z, σ_{ab} имеют одинаковую энергию активации E_a в температурной зависимости типа (1), означает, что собственно межслойный перенос заряда может предваряться движением вдоль слоя до оптимальных областей межслойного переноса.

Рассмотрим теперь поперечную проводимость $\sigma_z(h)$ в сильном продольном магнитном поле $\mathbf{h} = h(\cos\varphi, \sin\varphi, 0)$, лежащем в ab-плоскости под углом φ к ромбической оси a^*. В этом случае направления n_i чередующихся спинов соседних слоев плавно поворачиваются, оставаясь в пределах b^*c^*-плоскости (см. рис. 2), и зависят только от компоненты поля $h_{b^*} = h\cos\varphi$ вдоль ромбической оси b^*:

$$n_i = \left(0, \cos\frac{\beta}{2}, (-1)^i \sin\frac{\beta}{2}\right), \quad \beta = \beta(h_{b^*}). \tag{31}$$

Тогда средний квадрат матричного элемента, вычисленного по формуле (20), выражается через величины (27) следующим образом:

$$\overline{|M|^2} = \frac{1}{2}\left(\overline{|M_I|^2} + \overline{|M_{II}|^2}\right) + \\ + \frac{1}{2}\left(\overline{|M_I|^2} - \overline{|M_{II}|^2}\right)(\cos\beta - 1). \quad (32)$$

Здесь угол $\beta = \beta(h\cos\varphi)$ между направлениями средних чередующихся спинов слоев непрерывно меняется с проекцией поля на ось b^*. Анизотропия (32) согласуется с двухкратной (а не четырехкратной) анизотропией поперечной проводимости от направления поля в ab-плоскости, наблюдавшейся в [11].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Большое поперечное магнитосопротивление слабодопированного LSCO в диэлектрической фазе может быть объяснено влиянием диагональных страйп-структур в предположении, что проводимость осуществляется по сетке доменных стенок. Найденные решения среднего поля модели Хаббарда с диагональными доменными стенками, центрированными на связях, оказываются ниже по энергиям, чем решения с доменными стенками, центрированными на узлах. Поиск разных типов неоднородных решений показал, что локализация заряда возможна лишь на границах между антифазными (но не однофазными) AF-доменами. Электронный спектр таких структур включает в себя (наряду с верхней и нижней хаббардовскими зонами) квазиодномерные зоны внутри хаббардовской щели. Подтверждено, что этим зонам отвечают состояния, локализованные на доменных стенках и имеющие определенную спиновую структуру. Поперечная проводимость определяется переносом заряда между близкими доменными стенками соседних CuO_2-слоев, который зависит от совпадения или несовпадения спинов локализованных состояний этих стенок. Последнее регулируется относительной фазой AF-порядка доменов соседних слоев, на которую непосредственно влияет магнитное поле. Это влияние обязано наличию слабого ферромагнитного момента AF-областей слоев в LSCO и возможности переориентации WFM-моментов под действием магнитного поля.

Автор выражает искреннюю благодарность В. Я. Кривнову за полезные замечания и помощь в работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Схематичный учет конечной длины l когерентности волновых функций (длины свободного пробега) по оси η (ромбическая ось a^*) состоит в замене

$$\delta^2_{\tilde{k}_\eta,\tilde{k}'_\eta} \to \overline{\delta^2_{k_\eta,k'_\eta}} = \frac{l}{N_\eta a^*}\frac{4\sin^2(l\delta k_\eta)}{(l\delta k_\eta)^2}, \quad (33)$$

где $a^* = a_0\sqrt{2}$ — период структуры по η, $\delta k_\eta = \tilde{k}'_\eta - \tilde{k}_\eta$. При когерентности волновой функции вдоль всей длины по оси η квадрат δ-функции представлялся бы в виде

$$\delta^2_{\tilde{k}_\eta,\tilde{k}'_\eta} = \left|\frac{1}{N_\eta}\sum_{L=1}^{N_\eta} e^{i\delta k_\eta a^* L} e^{i\alpha_\nu}\right|^2 \quad (34)$$

с единой фазой α_ν. Здесь N_η — число звеньев диагональной доменной стенки вдоль оси a^*. Если же считать, что фаза остается постоянной лишь на «длине свободного пробега» l, и что фазы α_ν в разных областях случайны и некоррелированы, то в формуле (34) следует произвести замену (33).

Здесь подразумеваются обычные для теории полупроводников предположения [24] об изменении фаз, но не амплитуд волновых функций. Этого недостаточно для расчета абсолютных величин проводимости. Необходим детальный учет беспорядка — случайного потенциала, приводящего к андерсоновской локализации состояний и возникновению «порога подвижности», ниже которого проводимость равна нулю. Однако можно полагать, что эти факторы не зависят от магнитного поля, и, следовательно, при вычислении относительного изменения проводимости $\Delta\sigma_z(h)/\sigma_z(0)$ главный эффект возникает от влияния относительного спинового выстраивания соседних слоев на матричный элемент межслойного переноса между внутрищелевыми состояниями. Именно этот эффект и оценивается в данной работе.

Учтем теперь, что в $\delta(E_{\nu\tilde{k}} - E_{\nu'\tilde{k}})$ в (14) энергии внутрищелевых зон зависят лишь от k_η:

$$\delta(E_{1\nu} - E_{2\nu'}) = \delta(\tilde{k}_\eta - \tilde{k}_{\eta'})\left|\frac{dE_\nu}{d\tilde{k}_\eta}\right|^{-1} = \\ = \frac{a^* N_\eta}{2\pi}\delta_{k_\eta,k'_\eta}\left|\frac{dE_\nu}{dk_\eta}\right|^{-1}. \quad (35)$$

В результате для поперечной проводимости получаем выражение (21). В предположении, что длина свободного пробега $l \sim 100$ Å, $|M| \sim 20$ мэВ, ширина внутрищелевой зоны $B \sim 2$ эВ и период структуры характеризуется параметром $l = 20$, для абсолютной величины (21) получим оценку

$$\sigma_z \sim 1.2 \cdot 10^{-1} \Omega^{-1} \text{ см}^{-1}. \qquad (36)$$

Рассчитанную таким образом проводимость идеальной структуры следует, скорее, отождествлять с минимальной проводимостью у края подвижности (порога протекания) согласно идеологии теории полупроводников [24, 25]. Процессы андерсоновской локализации должны приводить к отличию реальной проводимости от идеальной (21) и, как следствие, к температурной зависимости (1) проводимости. Можно предположить, что различие не касается относительного изменения проводимости $\Delta\sigma/\sigma = [\sigma(h) - \sigma(0)]/\sigma(0)$ под действием магнитного поля. Поэтому $\Delta\sigma/\sigma$ оцениваем по формулам идеальной модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. W. Carlson, V. J. Emery, S. A. Kivelson, and D. Orgad, E-print archives, cond-mat/0206217; S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).
2. J. N. Tranquada, H. Woo, T. G. Perring et al., Nature **375**, 5561 (1995); Nature **429**, 531 (2004).
3. K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi et al., Phys. Rev. B **57**, 6165 (1998).
4. V. J. Emery, S. A. Kivelson, and O. Zachar, Phys. Rev. B **56**, 6120 (1997).
5. Y. Ando, A. N. Lavrov, S. Komia et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 017001 (2001).
6. T. Noda, H. Eisaki, and S. Uchida, Science **286**, 265 (2001).
7. A. N. Lavrov, Y. Ando, S. Komia, and T. Tsukada, Phys. Rev. Lett. **87**, 017007 (2001).
8. Y. Ando, K. Segawa, S. Komia, and A. N. Lavrov, Phys. Rev. Lett. **88**, 137005 (2002).
9. Y. Ando, A. N. Lavrov, and K. Segawa, Phys. Rev. Lett. **83**, 2813 (1999).
10. A. Gozar, B. S. Dennis, G. Blumberg et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 027001 (2004).
11. Y. Ando, A. N. Lavrov, and S. Komia, Phys. Rev. Lett. **90**, 247003 (2003).
12. S. Ono, S. Komia, and A. N. Lavrov, Phys. Rev. B **70**, 247003 (2003).
13. T. Thio, C. Y. Chen, B. S. Freer et al., Phys. Rev. B **41**, 231 (1990).
14. T. Thio and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **73**, 894, (1994).
15. T. Thio, T. R. Thurston, N. W. Preyer et al., Phys. Rev. B **38**, 905 (1988).
16. I. Dzyaloshinski, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 241 (1958).
17. T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
18. B. Keimer, A. Aharony, A. Auerbach et al., Phys. Rev. B **45**, 7430 (1992).
19. L. Benfatto and M. B. Silva Netto, E-print archives, cond-mat/0602419.
20. M. B. Silva Netto and L. Benfatto, Phys. Rev. B **72**, 140401 (2005).
21. M. B. Silva Netto, L. Benfatto, V. Juricic, and C. M. Smith, Phys. Rev. B **73**, 045132 (2006).
22. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **125**, 618 (2004).
23. L. Shekhtman, I. Ya. Korenblit, and A. Aharony, Phys. Rev. B **49**, 7080 (1994).
24. Н. Мотт, Э. Девис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, Мир, Москва (1982). [N. F. Mott and E. A. Devis, *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford (1979).]
25. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрон, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1982).
26. V. Ambegaokar, B. I. Halperin, and J. S. Langer, Phys. Rev. B **4**, 2612 (1971).
27. M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. M. A. Endoh, Rev. Mod. Phys **70**, 897 (1993).
28. T. Yoshida, X. J. Zhou, T. Sasagawa et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 027001 (2003).
29. X. J. Zhou et al., E-print archives, cond-mat/0604284.
30. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau et al., Phys. Rev. B **46**, 14034 (1992).
31. M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada et al., Phys. Rev. B **62**, 9148 (2000).
32. M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada et al., Phys. Rev. B **65**, 134515 (2002).
33. M. Matsuda, Y. S. Lee, M. Greven et al., Phys. Rev. B **61**, 4226 (2000).
34. H. J. Shulz, J. de Phys. **50**, 2833 (1989).

35. M. Salkola, V. J. Emery, and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **77**, 155 (1996).

36. V. J. Emery, S. A. Kivelson, and O. Zachar, Phys. Rev. **B 56**, 6120 (1997).

37. M. Granath, V. Oganesyan, D. Orgad, and S. A. Kivelson, Phys. Rev. B **65**, 184501 (2002).

38. M. Granath, Phys. Rev. B **69**, 214433 (2004).

39. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **127**, 120 (2005).

40. A. N. Lavrov, S. Komia, and Y. Ando, Nature **418**, 385 (2002).

41. S. Wakimoto, H. Kimura, M. Fujita et al., J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 075714 (2006); E-print archives, cond-mat/0603606.