

A_{1g}-МОДА В Hg-1201 ЯК ІНДИКАТОР N→S ПЕРЕХОДУ

Я. ДОВГІЙ

УДК 535.33; 537.312;
538.945
©2011

Львівський національний університет ім. Івана Франка
(Вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів 79005; e-mail: dovgy@physics.wups.lviv.ua)

На основі аналізу структури і температурних змін фононних спектрів HgBa₂CuO_{4+y} (Hg-1201) вперше визначено константу електрон-фононної взаємодії *g* і показано, що Hg-ВТНП є надпровідниками з сильним зв'язком. У фононному спектрі HgBa₂CuO_{4+y} виявлено ділянку частот поблизу 60,4 меВ, що має ознаки "м'якої моди". Основний парціальний внесок у функцію густини фононних станів у даній ділянці спектра дають коливання атомів O(2).

Той факт, що ртутновмісні високотемпературні надпровідники характеризуються високими баричними коефіцієнтами $\beta = dT_c/dP$, свідчить про те, що локальні деформації ґратки можуть тут відігравати більшу роль, ніж у багатьох інших ВТНП [1]. Тому детальні дослідження динаміки ґратки Hg-ВТНП стали предметом особливої уваги експериментаторів. З цією метою, крім традиційних оптико-спектральних досліджень фононних спектрів, найчастіше застосовують методи рентгеноабсорбційної спектроскопії та нейтронного розсіювання.

У даній роботі вперше визначено константу електрон-фононної взаємодії високотемпературного надпровідника HgBa₂CuO_{4+y} (Hg-1201).

Автори [2] вивчили тонку структуру рентгеноабсорбційних спектрів (XAFS-спектрів) HgBa₂CuO_{4+y} (*T_c* = 96 К) на предмет виявлення динамічних кореляцій (або антикореляцій) на зв'язках Cu–O(2) та Ba–O(2) (див. рис. 1). За аналізом цієї структури показано, що при *T* = 80 К взаємні зміщення атомів Cu та аксіальних атомів O(2), а також атомів Ba та атомів O(2) антикорельовані. Це означає, що у виразі для середньоквадратичного відхилення атомів *a* і *b*

$$\sigma_{ab}^2 = \sigma_a^2 - \sigma_b^2 - 2\sigma_a\sigma_b\Phi \tag{1}$$

параметр кореляції Φ є від'ємною величиною ($\Phi < 0$). Випадок $\Phi = 1$ відповідає сильній кореляції сусідніх атомів, а випадок $\Phi = 0$ – некорельованій динаміці більш віддалених атомів.

Чим зумовлена можливість антикореляції на зв'язках Cu–O(2) та Ba–O(2)? Ймовірно, вона зумовлена тим, що положення атома O(2) може бути різним залежно від того, чи суміжна позиція O(3) виявляється зайнятою, чи ні. Дійсно, дослідження спектрів комбінаційного розсіювання HgBa₂CuO_{4+y} показали, що A_{1g}-мода має дві складові, і це зумовлюється особливістю коливань O(2). Основний пік A_{1g}-дублета відповідає 592 см⁻¹, а менш інтенсивний – 570 см⁻¹ [3].

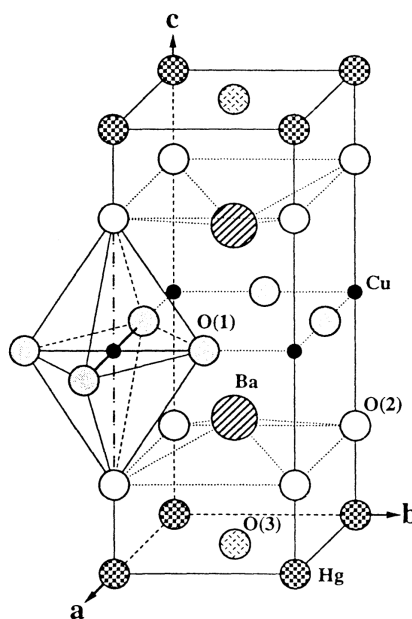


Рис. 1. Кристалічна структура HgBa₂CuO_{4+y} (Hg-1201). Вакансіям кисню відповідають положення O(3)

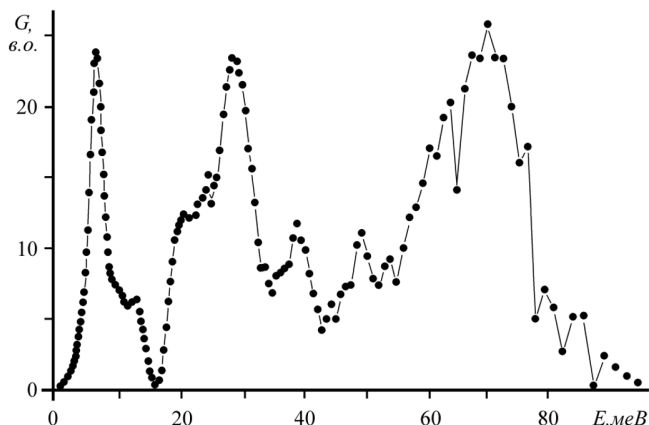


Рис. 2. Функція фононної густини станів $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$ при кімнатній температурі

Отже, маємо два можливих положення атомів $\text{O}(2)$, що зумовлюються локальним перерозподілом заряду. Даний фактор може стосуватися й механізму спарювання носіїв у CuO_2 -шарах. До речі, вказаний A_{1g} -дублет, як виявилось у [4], особливо чутливий до тиску.

На основі досліджень методом непружного розсіювання низькоенергетичних нейтронів вдалося отримати функцію узагальненої густини станів $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$ (рис. 2) [5]. Вимірювання проводили на реакторі в Греноблі. Використовували монокінетичний пучок нейтронів з енергією 17,4 меВ. Інтенсивність розсіювання реєстрували в кутовому діапазоні $23^\circ < \alpha < 99^\circ$, що при відомій методиці обробки результатів забезпечувало охоплення значного об'єму імпульсного простору та отримання надійних значень густини фононних станів $G(E)$.

Високоенергетична ділянка у структурі спектра $G(E)$ може бути пов'язана з кисневими модами подібно до $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ та Bi -ВТНП [6]. Зокрема основні піки 73,4 меВ (592 cm^{-1}) та 20,8 меВ (168 cm^{-1}) відповідають A_{1g} - та E_g -модам коливного спектра $\text{O}(2)$.

На рис. 3 наведено зіставлення експериментального спектра $G(E)$ з результатами модельних розрахунків. Силкові константи та інші параметри для обчислень було взято з огляду [7], в якому проаналізовано великий масив експериментальних даних щодо надпровідних оксидних купратів.

Як видно з рис. 3, експериментальні та розраховані спектри $G(E)$ якісно узгоджуються. Розбіжність у високоенергетичній ділянці пояснюється впливом дефектності реальних керамічних зразків. Чіткі піки поблизу 28 меВ (226 cm^{-1}) і 70 меВ (565 cm^{-1}) відповідають TO - та LO -модам вершинного кисню,

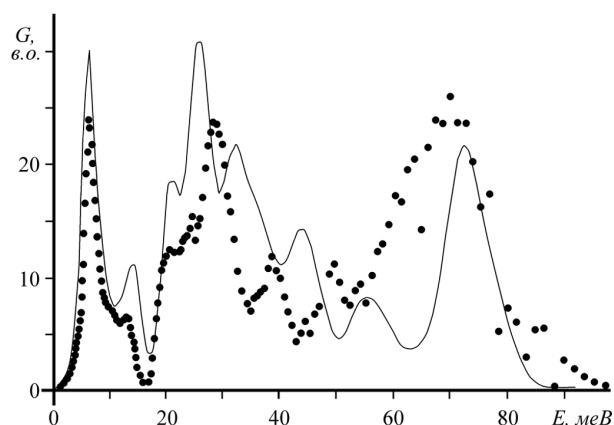


Рис. 3. Порівняння експериментального спектра (точки) з результатами модельних розрахунків (суцільна лінія)

причому ці моди є характерними для Hg -ВТНП з різною кількістю CuO_2 -шарів в елементарній комірці.

Як відомо [8, 9], у $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ фононна мода симетрії B_{1g} (335 cm^{-1}) має властивості “м'якої моди” і вона пов'язана з надпровідною щільною 2Δ . Чи існує подібна мода в Hg -ВТНП? У зв'язку з цим становить значний інтерес відстежування температурної поведінки фононних спектрів цих матеріалів.

На рис. 4 показано температурні зміни функції $G(E)$, одержані методом непружного розсіювання нейтронів на зразках $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$ [5]. Як видно, поблизу 60,4 меВ спостерігаються суттєві зміни спектра при охолодженні зразка до температури переходу у надпровідний стан. В інших ділянках спектр не знає помітних температурних змін.

Таким чином, мода 60,4 меВ в $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$ виявляє певні ознаки “м'якої моди”. Температурні зміни вказують, що в цьому діапазоні частот найбільший внесок в $G(E)$ дають коливання $\text{O}(2)$ і що дана мода може пов'язуватися з переходом із нормальної у надпровідну фазу. Дане припущення підтверджується у роботі [10], де автори спостерігали аналогічні температурні зміни при дослідженні раманівських спектрів Hg -ВТНП. М'яка мода коливань $\text{Cu-O}(2)$ була виявлена також авторами [11] при дослідженні оптимально допованих зразків $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$.

За аналогією до $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ми допускаємо, що енергетична щільна $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$

$$2\Delta \cong 60,4 \text{ меВ}, \tag{2}$$

звідки маємо

$$2\Delta/(kT_c) \approx 7,2. \tag{3}$$

Як відомо, за теорією БКШ співвідношення $2\Delta/(kT_c) = 3,52$, що вдвічі менше від (3). Така різниця невідповідність теорії БКШ, перш за все, може вказувати, що у сполуках Hg-ВТНП маємо справу зі значно сильнішим електрон-фононним зв'язком, ніж це передбачається в теорії БКШ.

Як відомо, відомості щодо симетрії та форми (в імпульсному просторі) щілини в енергетичному спектрі на поверхні Фермі надпровідника є вельми важливими для аналізу моделей спарювання.

В Hg-1201, як і в інших оксидних купратах, надпровідність зумовлена куперівським спарюванням d -типу, так що енергетична щілина може мати нулі на поверхні Фермі. Однак відсутність детальних даних щодо топології поверхні Фермі поки що не дозволяє судити про характер анізотропії d -спарювання в цьому матеріалі.

Температурна поведінка “індикаторної” смуги свідчить про те, що електрон-фононна взаємодія є суттєвою у механізмі спарювання. Не можна виключати з розгляду також механізму, пов'язаного зі спіновими флуктуаціями, адже достеменно встановлено, що оксидні купрати відносяться до систем із сильними електронними кореляціями. Варті уваги й інші моделі [12]. У зв'язку з цим однозначна інтерпретація природи енергетичної щілини в Hg-1201 є проблематичною¹.

У даній роботі зроблено спробу оцінки величини константи електрон-фононної взаємодії g у рамках моделі сильного зв'язку. Нами використано апроксимаційну формулу Аллена–Дайнса [14]:

$$T_c \cong \left(\frac{f_1 f_2}{1,20} \omega_a \frac{\hbar}{k} \right) \exp \left[-\frac{1,04(1+g)}{g - \mu^*(1+0,62g)} \right], \quad (4)$$

де

$$f_1 = \left[1 + (g/a_1)^{3/2} \right]^{1/3}, \quad (5)$$

$$f_2 = 1 - \frac{g^2(1 - \omega_0/\omega_a)}{g^2 + a_2^2}, \quad (6)$$

$$a_1 = 2,46(1 + 3,8\mu^*), \quad (7)$$

$$a_2 = 1,82(1 + 6,3\mu^*)\omega_0/\omega_a, \quad (8)$$

¹ Зауважимо, що для систем з частковою діелектризацією електронного спектра можливе виникнення також щілини моттовського типу [13].

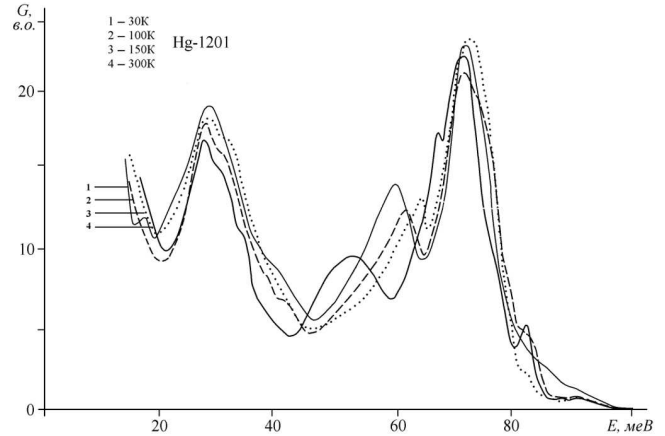


Рис. 4. Температурні зміни фононних мод HgBa₂CuO_{4+y}

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln(E_F/(\hbar\omega_D))}, \quad (9)$$

μ – параметр, що характеризує кулонівське відштовхування носіїв, ω_D – дебаєвська частота, k – стала Больцмана.

З аналізу функції $G(E)$, зображеної на рис. 2, одержали

$$\hbar\omega_0 \cong 28,5 \text{ меВ}. \quad (10)$$

Якщо взяти до уваги, що

$$\hbar\omega_a \cong 2\Delta, \quad (11)$$

а параметр модифікованого кулонівського потенціалу згідно з [15], дорівнює

$$\mu^* \cong 0,13, \quad (12)$$

то після громіздких обчислень одержуємо

$$g \cong 2,0. \quad (13)$$

Таким чином, можна стверджувати, що ртутновмісні високотемпературні надпровідники характеризуються сильним електрон-фононним зв'язком. Пошук закономірностей зміни параметра g залежно від кількості CuO₂-шарів в елементарній комірці буде предметом наших подальших досліджень.

1. Я.О. Довгий, УФЖ **46**, 585 (2001).
2. С.Н. Booth, F. Bridges, E.D. Bauer, G.G. Li, J.B. Boyce, T. Claeson, C.W. Chu, and Q. Xiong, Phys. Rev. B **52**, 15745 (1995).
3. H.G. Lee, H.S. Shin, I.S. Yang, J.J. Yu, and N.H. Hur, Physica C **233**, 35 (1994).

4. I.-S. Yang, H.-S. Shin, and H.-G. Lee, Phys. Rev. B **51**, 644 (1995).
5. B. Renker, H. Schober, and F. Gompf, J. Low. Temp. Phys. **105**, 843 (1996).
6. B. Renker, F. Gompf, D. Ewert, P. Adelman, H. Schmidt, E. Gering, and H. Mutka, Z. Phys. B **77**, 65 (1989).
7. S.L. Chaplot, W. Reichardt, L. Pintschovius, and N. Pyka, Phys. Rev. B **52**, 7230 (1995).
8. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников* Под ред. Д. Гинзбурга (Мир, Москва, 1990).
9. R. Zeyher and G. Zwicknagl, Z. Phys. B **78**, 175 (1990).
10. M.C. Krantz, C. Thomsen, H. Mattausch, and M. Cardona, Phys. Rev. B **50**, 1165 (1994).
11. H. Uchiyama, A.Q.R. Baron, S. Tsutsui, Y. Tanaka, W.-Z. Hu, A. Yamamoto, S. Tajima, and Y. Endoh, Phys. Rev. Lett. **92**, 197005 (2004).
12. Я.О. Довгий, *Чарівне явище надпровідність* (Євро-світ, Львів, 2000).
13. A.M. Gabovich, A.I. Voitenko, and M. Ausloos, Phys. Rep. **367**, 583 (2002).
14. P.B. Allen and R.C. Dynes, Phys. Rev. B **12**, 905 (1975).
15. H.B. Radousky, T. Jarlborg, G.S. Knapp, and A.J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 1208 (1982).

Одержано 08.06.11

A_{1g}-МОДА В Hg-1201 КАК ИНДИКАТОР N→S ПЕРЕХОДА

Я. Довгий

Резюме

На основе анализа структуры и температурных изменений фоновых спектров HgBa₂CuO_{4+y} (Hg-1201) впервые определено константу электрон-фононного взаимодействия g и показано, что Hg-ВТНП являются сверхпроводниками с сильной связью. В фоновом спектре HgBa₂CuO_{4+y} выявлено участок частот вблизи 60,4 мэВ с признаками “мягкой моды”. Основной частичный вклад в функцию плотности фононных состояний на данном участке спектра дают колебания атомов O(2).

THE A_{1g} MODE IN THE Hg-1201 PHONON SPECTRUM AS AN INDICATOR OF N→S TRANSITION

Ya. Dovhuj

Ivan Franko National University of L'viv
(8, Kyrylo i Mefodiy Str., Lviv 79005, Ukraine
e-mail: dovgy@physics.wups.lviv.ua)

Summary

By analyzing the structure of and the temperature changes in HgBa₂CuO_{4+y} phonon spectra, the electron-phonon coupling constant g has been determined for the first time. It is shown that this compound is a superconductor with strong coupling. A frequency interval around 60.4 meV in the HgBa₂CuO_{4+y} phonon spectrum, which may be classed as a “soft mode”, is revealed. The dominant partial contribution to the density of phonon states in that spectral range is found to be given by O(2) atomic vibrations.