

Г-152

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

17-92-451

**ГАЛБААТАР
Тувдэндоржийн**

УДК 538.945

**ЭФФЕКТЫ РЕШЕТОЧНОГО АНГАРМОНИЗМА
В СВЕРХПРОВОДНИКАХ**

Специальность: 01.04.02 - теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1992

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук
профессор Н.М.Плакида

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Стасюк И.В. ИФКС АН Украины, г.Львов

доктор физико-математических наук,
Жернов А.П. ИАЭ им. Курчатова, г.Москва

Ведущая организация:

Вильнюсский Университет.

Защита диссертации состоится " " _____ 1992 года
на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории
теоретической физики Объединенного института ядерных исследо-
ваний, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного
института ядерных исследований.

Автореферат разослан " " _____ 1992 года.

Ученый секретарь

Специализированного совета

кандидат физико-математических наук

А. Е. Дорохов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В итоге интенсивных исследований взаимосвязи сверхпроводящих свойств и кристаллической структуры в традиционных низкотемпературных сверхпроводниках достигнуты определенные успехи в понимании специфики фононного механизма сверхпроводимости. В частности, так называемое "эмпирическое правило" утверждает, что чем выше степень структурной неустойчивости, тем выше температура сверхпроводящего перехода T_c [1]. Среди известных низкотемпературных сверхпроводников наиболее высокие значения T_c (от 10К до 23К) имеют интерметаллиды и химические соединения на основе переходных металлов. Типичными представителями этих классов сверхпроводников являются соединения со структурой $A15$ или $NaCl$, также фазы Лавеса. Существуют прямые экспериментальные доказательства того, что в большинстве этих соединений, кроме таких особенностей как дефекты, структурный беспорядок, сосуществования разных фаз и т.д. наблюдаются сильные ангармонические эффекты решетки. Важность эффектов ангармонизма в определении сверхпроводящих свойств подчеркивалось в разных работах (см., например, [2]). Теоретическое рассмотрение этого вопроса, в частности, позволило объяснить аномальный изотопический эффект в системе PdH_x [3]- [4].

В последнее время наблюдается повышенный интерес к эффектам ангармонизма. Это обусловлено, с одной стороны, теоретическим поиском основного механизма спаривания электронов в куперовские пары в недавно открытых металлооксидных высокотемпературных сверх-

проводниках (ВТСП) со структурой перовскита. В частности в работе [5] было теоретически показано, что взаимодействие электронов с сильноангармоническими колебаниями решетки может привести к заметному повышению T_c . После открытия ВТСП в металлооксидных соединениях со структурой перовскита [6] на основе работы [5] была предложена ангармоническая модель ВТСП [7]. В этой работе было показано, что взаимодействие электронов с низкоэнергетическими, сильноангармоническими колебаниями ионов кислорода на определенных узлах решетки в металлооксидных сверхпроводниках приведет к увеличению эффективного электрон-электронного притяжения. Подобные идеи высказывались также в работах других авторов [8, 9]. Однако большинство этих работ были выполнены на качественном уровне и ограничивались рассмотрением T_c .

С другой стороны, большое количество экспериментальных работ, посвященных динамике решетки и роли решеточных возбуждений в сверхпроводниках показывают для большинства металлооксидных ВТСП наличие ангармонизма в колебаниях ионов кислорода, аномальное поведение изотопического эффекта, а также признаки сильной электрон-фононной связи, в частности, большое значение щели и большие критические поля.

Поэтому представляет интерес изучение связи решеточного ангармонизма со сверхпроводящими свойствами в таких материалах.

В настоящей диссертации последовательно исследуется влияние ангармонизма на такие сверхпроводящие свойства, как T_c , изотопический эффект, верхнее критическое поле и энергетическая щель в рамках теорий сильной связи. На примере сверхпроводящих гидридов пе-

редных металлов и их сплавов с благородными металлами изучается возможность применения ангармонической модели ВТСП к реальным системам. Обсуждается возможность обнаружения ангармонических колебаний атомов в двойной потенциальной яме с помощью нейтронно-спектроскопии.

Цель работы. Исследовать влияние ангармонизма решетки на сверхпроводящие свойства:

1. Развить ангармоническую теорию сверхпроводимости, которая является естественным обобщением фононного механизма сверхпроводимости. Изучить влияние ангармонизма на сверхпроводящие свойства, как T_c , изотопический эффект, верхнее критическое поле и энергетическая щель.
2. Установить область применимости псевдоспинового формализма для описания свойств сверхпроводников с ангармонической решеткой.
3. Изучить возможность реализации ангармонической модели в различных системах.
4. Изучить возможность обнаружения ангармонизма с помощью методов нейтронно-спектроскопии. Вычислить сечение неупругого рассеяния нейтронов на ангармонических колебаниях решетки.

Научная новизна. В диссертации сформулирована модель для описания электрон-фононного взаимодействия, учитывающая сильноангармоническое поведение кристаллической решетки. Данная модель при учете вклада оптических фононов впервые разрешает теоретически объяснить аномальное поведение изотопического эффекта, т.е. изменение его знака при некоторой критической концентрации примесей

благородных металлов в сплавах гидридов переходных металлов с благородными металлами.

Проведен анализ влияния решеточного ангармонизма на сверхпроводящие свойства сверхпроводников с сильным ангармонизмом. Расчеты показывают, что решеточный ангармонизм может привести к заметному повышению T_c , причем наиболее высокие значения T_c получены для мягких исходных потенциалов. Для максимального относительного повышения T_c предпочтителен сравнительно жесткий исходный потенциал.

Показано, что в пределе слабой связи изотопический эффект подавляется из-за доминирующей массовой зависимости константы электрон-фононного взаимодействия, тогда как в пределе сильной связи сильная массовая зависимость характерной фононной частоты может привести к тому, что экспонента изотопического эффекта будет больше 0.5. Из-за температурной зависимости константы электрон-фононного взаимодействия, обусловленной ангармонизмом, верхнее критическое поле может принимать достаточно большие значения, причем кривая температурной зависимости имеет положительную кривизну.

Показано, что в отличие от гармонической теории, в пределе сильной связи отношение Δ/T_c (Δ -щель) может стать неограниченной в ангармонической модели.

Таким образом, учет решеточного ангармонизма может привести к значительным поправкам к теории сильной связи в гармоническом приближении.

Предложен способ обнаружения ангармонических колебаний с помощью нейтронной спектроскопии. Впервые показано, что ангармо-

низм может обуславливать аномальную температурную зависимость сечения неупругого рассеяния, а в случае рассеяния на мягких ротационных модах также дополнительно аномальную угловую зависимость сечения.

Аппробация работы. Результаты, представленные в диссертации, обсуждались на семинаре по теории твердого тела ЛТФ ОИЯИ, а также были представлены и докладывались на Европейской конференции по ВТСП - пленкам и монокристаллам (Уштрон, Польша, 1989), третьей Международной конференции "Материалы и механизмы сверхпроводимости, ВТСП (Каназава, 1991, Япония), Международном семинаре "Решеточные эффекты в ВТСП" (Санта Фе, США, 1992), Международной конференции по ВТСП (Пекин, Китай. 1992).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 8 работ в печати, список которых приведен в конце автореферата [13 – 20].

Объем работы. Диссертация состоит из вводной и трех основных глав, заключения. Список библиографии содержит 113 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во вводной Главе обоснована актуальность темы диссертации. Дан обзор работ, посвященных исследованию роли структурной неустойчивости в сверхпроводниках.

Вторая глава посвящена изучению сверхпроводимости в метастабильных фазах гидридов переходных металлов и их сплавов с благородными металлами в рамках ангармонической модели в двухуровневом приближении. Сначала кратко изложена ангармоническая модель. Гамильтониан, описывающий систему электронов, взаимодействующих с

ангармоническими колебаниями ионов, в общем случае имеет вид

$$H = H_e + H_s + H_{e-s} \quad (1)$$

где $H_e = \sum \epsilon a^\dagger a$ как обычно электронная часть гамильтониана (1). H_s , описывающий колебание ионов в ангармоническом двухъямном потенциале удобно записать в псевдоспиновом представлении [7]

$$H_s = -\Omega \sum_i S_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_{ik} S_i^x S_k^x \quad (2)$$

где $\Omega = E_a - E_s > 0$ разность энергий двух нижних состояний Ψ_a, Ψ_s . J_{ik} - эффективное взаимодействие между различными ячейками. $S_i^\alpha (\alpha = x, z)$ - псевдоспиновый оператор для спина $S = \frac{1}{2}$, действующий в пространстве (Ψ_s, Ψ_a) . В этом представлении H_{e-s} может быть записан как

$$H_{e-s} = \sum_{p,p',q,\sigma} V_q(p,p') 2x_{sa} S_q^z a_{p\sigma}^\dagger a_{p'\sigma} \quad (3)$$

где V_q -деформационный потенциал. $x_{sa} = \langle \Psi_s | x | \Psi_a \rangle$ - матричный элемент между состояниями Ψ_a и Ψ_s . Статическая восприимчивость данной двухуровневой системы (ДУС) χ_s вычисляется стандартным образом и имеет вид (в системе единиц $k_B = \hbar = 1$)

$$\chi_s = \text{Re} \langle \langle \delta S_q^x | \delta S_{-q}^x \rangle \rangle = \frac{(2x_{sa})^2}{\omega_s} \tanh \frac{\Omega}{2T} \quad (4)$$

где ω_s - усредненная частота ДУС. В представлении Макмиллана константу электрон-псевдоспиновой связи запишем в виде

$$\lambda_s = \eta_s \chi_s = \eta_s \frac{(2x_{sa})^2}{\omega_s} \tanh \frac{\Omega}{2T} \quad (5)$$

и для константы электрон-фононной связи λ_p , как обычно примем

$$\lambda_p = \eta_p \chi_p = \eta_p \frac{1}{M\omega^2} \quad (6)$$

где ω - усредненная частота гармонических фононов. Предполагая, что $\eta_s \approx \eta_p$ и используя экспериментальные данные (например, [10]), можно оценить

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_p} \approx \frac{\chi_s}{\chi_p} \geq 10 \quad (7)$$

Таким образом, увеличение λ_s за счет высокой восприимчивости ангармонической моды может привести к повышению T_c . В отличие от гармонической теории (6) λ_s (формула (5)) зависит от массы. Это обстоятельство имеет важные последствия для поведения изотопического эффекта. Температурный фактор $S^z = \tanh \frac{\Omega}{2T}$ в формуле (5) для константы связи может изменить температурную зависимость энергетической щели и верхнего критического поля.

Исследуется сверхпроводимость в метастабильных фазах гидрида титана в рамках ангармонической модели в двухуровневом приближении. Предполагая наличие локальной структурной неустойчивости, связанной с колебаниями водорода в двухъямном потенциале, спектральная функция Элиашберга представляется в следующем виде

$$\alpha^2 F(\omega) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i^2 F_i(\omega) = \sum_{i=1}^4 \frac{\lambda_i \omega_i}{2} \delta(\omega - \omega_i) \quad (8)$$

где индекс $i = 1, \dots, 4$, соответствует вкладам от ДУС, акустических фононов и оптических фононов, связанных с колебаниями водорода в октаэдрических (О) и тетраэдрических (Т) междоузлиях, соответственно. ДУС описывается двухъямным модельным X^4 -потенциалом.

Используя экспериментальные данные по нейтронной спектроскопии [11, 12], мы фиксируем параметры потенциала (т.е. высоту центрального барьера и расстояние между двумя минимумами).

Спектральная функция $\alpha^2 F(\omega)$ использовалась в качестве подгоночного параметра. На основе численного решения матричных уравнений Элиашберга для заданного из эксперимента значения $T_c(H)$ определялась спектральная функция $\alpha^2 F(\omega)$. Используя это значение и моделируя изотопическое замещение водорода дейтерием, мы определили $T_c(D)$ из уравнения Элиашберга. Сравнение результатов наших расчетов с экспериментом показало очень хорошее согласие для системы $TiN(D)_x$. Далее данная модель используется для изучения аномального поведения изотопического эффекта и при учете оптических фононов впервые разрешает описать аномальную зависимость изотопического эффекта от концентрации примесей атомов благородных металлов. Следует отметить, что исследование таких сравнительно простых систем является перспективным для проверки различных теоретических моделей.

Третья глава посвящена детальному исследованию роли решеточного ангармонизма на сверхпроводящие свойства. Ангармоническая модель обобщается на многоуровневый случай для изучения области применения псевдоспинового формализма.

Рассматривается однокомпонентная ангармоническая мода без дисперсии. Соответствующий модельный потенциал составлен из гармонической и гауссовской части, т.е.

$$\Phi(x) = \frac{fx^2}{2} + \frac{fa}{2b} \exp(-bx^2) \quad (9)$$

Гауссовский член моделирует локальную неустойчивость решетки. Степень ангармоничности определяется высотой центрального барьера

$$\Phi_0 = \frac{a-1-\ln a}{2bx_0} \quad (10)$$

где $a \geq 1$, $x_0 = \sqrt{h/M\omega_0}$ - амплитуда нулевых колебаний в гармоническом потенциале с частотой $\omega_0 = \sqrt{f/M}$. Для значения $a > 1$, $\Phi(x)$ имеет двухъямный вид с расстоянием между минимумами $d_0 = \pm \sqrt{\ln a/b}$.

Константа электрон-фононного взаимодействия определяется следующим соотношением

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega = \eta \chi \quad (11)$$

где $\eta = N(0) \langle V^2 \rangle$ - параметр Хопфильда, $N(0)$ - плотность электронных состояний на поверхности Ферми и $\langle V^2 \rangle$ - усредненный деформационный потенциал, χ - статическая восприимчивость решетки, определяемая фурье-компонентой запаздывающей функции Грина $\langle\langle x|x \rangle\rangle_{\omega=0}$, где x - оператор смещения. Вычисление χ производится с помощью спектрального представления

$$\chi_s(0) = - \langle\langle x|x \rangle\rangle_{\omega=0} = Z^{-1} \sum_{n=0}^\infty \sum_m \frac{f_n - f_m}{2} | \langle m|x|n \rangle |^2 \quad (12)$$

где $Z = \sum_n f_n$ и $f_n = \exp(-\frac{E_n}{kT})$.

В гармонической теории ряд в (12) можно просуммировать по n и $m = n \pm 1$ получить обычное выражение

$$\chi^{har} = \frac{1}{M\omega_0^2} \quad (13)$$

Однако в ангармоническом случае, когда энергетические уровни расположены не эквидистантно ряд (12) просуммировать не удастся. Для качественного рассмотрения можно воспользоваться двухуровневым приближением. Решение уравнения Элиашберга в пределе $\omega_{01} \rightarrow 0$ дает:

$$T_c = 0.253 \lambda_0^{1/3} \omega_{01}^{2/3}, \quad \lambda_0 = 2x_{01}^2 \eta \quad (14)$$

$$\frac{2\Delta_0}{T_c} \sim \lambda^{1/6} \quad (15)$$

$$\alpha = 1/3(1 + \ln(a\Omega/\omega_{01})), \Omega \gg \omega_{01} \quad (16)$$

где Ω - энергия нулевых колебаний в изолированной одной яме.

Температурная зависимость константы электрон-фононного взаимодействия также влияет на поведение верхнего критического поля $H_{c2}(T)$. Исследование $H_{c2}(T)$ на основе уравнений Элиашберга в присутствии магнитного поля показывает, что ангармонизм приводит к значительному увеличению критического поля, которое может достигать значений $H_{c2}(T) \sim 100T$ при $\lambda \sim 15$. Таким образом, температурная зависимость константы электрон-фононного взаимодействия, обусловленная ангармонизмом может привести к поведению сверхпроводящих свойств, сильно отличающихся от гармонической теории. Учет вышележащих уровней делает температурную зависимость более слабой, чем в двухуровневом приближении.

В четвертой главе рассматривается ядерное неупругое рассеяние нейтронов на сильноангармонических колебаниях ионов кислорода, в частности, ионов кислорода одномерной цепочки Cu-O в YBaCuO. На

основе псевдоспиновой модели для описания ротационных колебаний жестких O-Cu-O молекул, с помощью метода двухвременных функций Грина получены выражения для когерентного и некогерентного сечений рассеяния.

Функция рассеяния для ротационных колебаний в данной модели имеет вид:

$$S_{coh}(\vec{k}, \omega) = a_{coh}^2 e^{-2W} \frac{\kappa_x^2}{2M} (2\xi_{01})^2 \sin^2\left(\frac{\kappa a}{2}\right) \frac{[1 + N(\omega)]}{\pi} \text{Im}[\chi_q^{xx}(\omega + i\delta)] \quad (17)$$

Вычисляя в приближении хаотических фаз динамическую восприимчивость $\chi_q^{xx}(\omega)$, находим, что дважды дифференциальное сечение рассеяния нейтронов на ангармонических колебаниях в двойной яме зависит от температуры аномальным образом. Фактор $\sin^2(\frac{\kappa a}{2})$ в выражении (17) обуславливает аномальную угловую зависимость сечения рассеяния на ротационных модах из-за антифазных вращений в соседних ячейках.

В Заключении сформулированы следующие основные результаты диссертации, выдвигаемые на защиту:

1. Исследована роль двухуровневых систем в сверхпроводимости в метастабильных фазах гидридов переходных металлов и их сплавов с благородными металлами. Выяснено, что необходимо учесть вклады как ДУС, так и оптических фононов для объяснения аномального изотопического эффекта в этих системах.
2. Решеточный ангармонизм существенно влияет на изотопический эффект. Выяснено, что в ангармонической модели возможен как аномально большой ($\alpha > 0.5$) изотопический эффект в пределе сильной связи так и обратный изотопический эффект ($\alpha < 0$) в случае слабой

связи.

3. Обнаружено, что вследствие сильного ангармонизма верхнее критическое поле может принимать значительно большие значения чем в гармонической теории.

4. Оценки в пределе сильного ангармонизма показывают, что отношение $2\Delta/T_c$ может иметь неограниченно большие значения при $\lambda \sim \infty$ в отличие от гармонической теории, где это отношение достигает насыщения.

5. Показано, что псевдоспиновый формализм для описания ангармонизма является достаточно хорошим приближением в широкой области параметров ангармонических потенциалов.

6. Показано, что сильный ангармонизм может обуславливать аномальную температурную и угловую зависимость сечения неупругого рассеяния нейтронов.

- [1] B.T.Matthias, Mater.Res.Bull, 5,(1975),665.
- [2] L.R.Testardy, Phys.Rev. B5, (1972), 4342.
- [3] А.Е.Каракозов, Е.Г.Максимов, ЖЭТФ, 74,(1978),681.
- [4] B.N.Ganguly, Phys.Rev. B14,(1976), 3848.
- [5] G.M.Vujicic, V.L.Aksenov, N.M.Plakida and S.Stamenkovic, Phys.Lett A73,(1979), 439.
- [6] J.G.Bednorz and K.A.Müller, Z.Phys. B64,(1986), 189.
- [7] N.M.Plakida, V.L.Aksenov and S.L.Drechsler, Europhys.Lett.,4(11),(1987),1309
- [8] R.A.Zacher, Phys.Rev. B36,(1987),7115.
- [9] J.R.Hardy and J.W.Flocken, Phys.Rev.Lett., 60,(1988),2191.
- [10] A.W.Hewat et al., Physica C153, (1988),962.
- [11] А.И.Колесников и др., П.ЖЭТФ.,44,(1986),509.
- [12] A.I.Kolesnikov et al., Z.Phys.Chem. N.F.163,(1989),709.
- [13] T.Galbaatar, R.-J.Rakauskas and J.Sulskus Isotope effect ($^{16}O - ^{18}O$) in the anharmonic model of high- T_c superconductors. JINR Rapid Commun. 4[30] (1988) 28.

- [14] T.Galbaatar, R.-J.Rakauskas and J.Sulskus, Numerical simulation of the isotope effect in the high- T_c superconductors. IJMP B, v.3 (1989) 897-908.
- [15] T.Galbaatar, N.M.Plakida and S.L.Drechsler, Superconductivity in the metastable phases of transition metal hydrides. Z.Phys. B, v.77 (1989), 387-392.
- [16] N.M.Plakida, V.L.Aksenov, S.L.Drechsler, T.Galbaatar, R.J.Rakauskas, S.Stamenkovic, Evidence for out-of-plane oxygen modes in HTSC's from inelastic neutron scattering - possible implication for superconductivity. In: Progress in High- T_c Superconductivity, vol. 24, World Scientific, Singapore. Eds: W.Gorzowski, M.Gutowski, A.Reich, H.Szymczak (1990) 568-574.
- [17] N.M.Plakida, V.L.Aksenov, S.L.Drechsler, T.Galbaatar, S.Stamenkovic. Inelastic neutron scattering in the anharmonic model of high- T_c superconductors. Mod.Phys.Lett. B, v.4 (1990), 341-346.
- [18] T.Galbaatar, S.L.Drechsler, N.M.Plakida and G.M.Vujicic. Isotope effect in a superconductor with strong anharmonicity. Physica C v.176 (1991), 496-502.
- [19] T.Galbaatar, S.L.Drechsler, N.M.Plakida, G.M.Vujicic. On the influence of anharmonicity on the isotope effect. Physica C, v.185-189 (1991), 1529-1530.
- [20] T.Galbaatar, S.L.Drechsler. The upper critical field of an anharmonic superconductor. Physica C, v.191 (1992), 377-382.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 ноября 1992 года.