

4-496

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-95-278

На правах рукописи
УДК 538.945+
538.913

ЧЕРНЫЙ
Александр Юрьевич

**СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В КРИСТАЛЛАХ
СО СТРУКТУРНЫМИ ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1995

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им.
Н.Н.Боголюбова Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук
профессор

Н.М. Плакида

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор

В.Л. Аксенов
(ЛНФ ОИЯИ, Дубна)

кандидат физико-математических наук

О.В. Долгов
(ФИРАН, Москва)

Ведущая организация:

Российский Научный Центр "Курчатовский институт", г. Москва.

Защита диссертации состоится " _____ " _____ 1995 года на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан " _____ " _____ 1995 года.

Ученый секретарь
Специализированного совета
доктор физико-математических наук



А.Е. Дорохов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

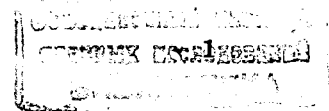
Актуальность темы.

В начале 1986 года К.А.Мюллер и Й.Г.Беднорц обнаружили появление сверхпроводимости в купрате лантана с примесями атомов бария при температуре около 35 К. Это открытие вызвало огромный поток исследований и публикаций. За последующие годы были открыты новые классы высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) с температурами перехода до 160 К (такую рекордную на сегодняшний день температуру сверхпроводящего перехода имеет под высоким давлением соединение $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ при $n \geq 3$).

Эксперименты по измерению кванта магнитного потока, наблюдение ступенек Шапиро на вольт-амперной характеристике в нестационарном эффекте Джозефсона, эксперименты по Андреевскому отражению, а также измерение сдвига Найта указывают на наличие куперовских пар с нулевым импульсом и спином, хотя механизм, приводящий к спариванию, остается неясным.

С вопросом о микроскопическом механизме сверхпроводимости тесно связана другая, не менее интересная проблема, — описание электронных свойств ВТСП в нормальной фазе. Альтернативой обычной ферми-жидкостной картине нормального состояния ВТСП остается теория Андерсона, основанная на идее о разделении спиновых и зарядовых степеней свободы при наличии сильных одноузельных кулоновских корреляций. Однако для ВТСП в металлической фазе экспериментально наблюдается достаточно хорошо определенная большая поверхность Ферми, что характерно для обычных металлов. Поэтому использование обычного ферми-жидкостного подхода для ВТСП, находящихся в металлической фазе, представляется вполне допустимым.

С другой стороны, имеются доказательства того, что электрон-фононное взаимодействие дает вклад в сверхпроводящее спаривание. Это, во-первых, изотопический эффект (ИЭ) — изменение температуры сверхпроводящего перехода при изменении массы атомов. Для количественного описания этого эффекта вводится фактор



ИЭ для атомов сорта i :

$$\alpha_i = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M_i}, \quad (T_c \sim M_i^{-\alpha_i}),$$

где M_i - масса атома сорта i , T_c - температура сверхпроводящего перехода. Оказалось, что изотопический фактор для кислорода сильно зависит от примеси допирующих элементов, меняясь в диапазоне от нескольких сотых до значений, превышающих 0.5 (например в $\text{La}_{1.88}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$ различные эксперименты дают значения α от 0.6 до 1.1), что необъяснимо в рамках теории БКШ.

Во-вторых, изменение частоты и затухания некоторых оптических мод при понижении температуры ниже T_c в экспериментах по комбинационному рассеянию.

В-третьих, наличие аномалий в динамике решетки, наблюдаемых в широком диапазоне температур, и их изменение при переходе через T_c . Так, эксперименты по дифракции рентгеновских лучей обнаруживают несколько структурных фазовых переходов (СФП) на T - x диаграмме для соединений $\text{La}_{2-x}\text{Me}_x\text{CuO}_4$, которые связаны с конденсацией мягких мод типа "качания" с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна. При этом подавление сверхпроводимости в $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ при $x=0.125$ (провал в зависимости $T_c(x)$) находится во взаимосвязи со СФП из ЛТО (пространственная группа D_{2h}^{18}) в ЛТТ фазу (D_{4h}^{16}). При этой же концентрации примеси в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ наблюдается скачок ИЭ.

Таким образом, разработка новых и модификация уже существующих электрон-фононных механизмов спаривания является весьма актуальной проблемой.

В диссертационной работе рассматривается ангармоническая модель ВТСП, предложенная Н.М.Плакидой, В.Л.Аксеновым и С.Дрекслером. В этой модели предполагается, что электрон-фононное взаимодействие может усиливаться за счет роста восприимчивости решетки из-за ее смягчения при СФП.

На сегодняшний день, когда предложено более ста тридцати различных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости, актуальной задачей становится выявление качественных физических эффектов, предсказываемых в рамках того или иного механизма, для последующей возможной экспериментальной проверки.

Наиболее интересные эффекты, которые предсказывает ангармоническая модель сверхпроводника, связаны с температурной и массовой зависимостью электрон-фононной постоянной $\lambda = \lambda(M, T)$ для ангармонических колебаний. По существу, основной задачей данной диссертации является изучение некоторых физических эффектов в рамках ангармонической модели ВТСП, которые являются следствиями взаимодействия электронов с мягкими модами при наличии СФП. Эти эффекты - влияние СФП на ИЭ и сверхпроводящую щель в электронном спектре.

Таким образом, исследование влияния СФП на ИЭ и сверхпроводящую щель в электронном спектре является актуальным и важным как с точки зрения теории, так и практического применения.

Цель работы.

1. Получить зависимость частоты мягких мод ω_1 и ω_2 от температуры в рамках феноменологической теории Ландау для последовательности СФП в соединениях $\text{La}_{2-x-y}\text{Re}_y\text{Me}_x\text{CuO}_4$ (Re - редкоземельный элемент, Me=Ba, Sr, Ca).
2. Рассмотреть влияние СФП типа "смещения" на ИЭ. Сопоставить результаты с экспериментальными данными для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.
3. Изучить влияние СФП типа "порядок-беспорядок" на ИЭ. Сравнить полученные результаты с результатами для ИЭ при СФП типа "смещения".
4. На примере точно решаемой модели СФП в решетке рассмотреть влияние критических флуктуаций на ИЭ при температуре СФП.
5. На основе решения нелинеаризованных уравнений Элиашберга на действительной оси изучить эффект влияния СФП на энергетическую щель в электронном спектре.

Научная новизна работы.

Впервые на основе единого термодинамического потенциала исследована температурная зависимость частоты мягких мод, ответственных за СФП в соединениях купрата лантана. Рассмотрены случаи свободных и зажатых статических восприимчивостей для мягких мод колебаний.

Рассмотрен ИЭ при наличии СФП для ангармонической модели сверхпроводника с мягкими модами типа "качания". Исследованы случаи СФП в решетке типа "смещения" и "порядок-беспорядок". Дано качественное объяснение наблюдаемого в экспериментах изменения фактора ИЭ от концентрации примесей, при этом получен скачок фактора ИЭ при переходе в новую фазу.

Впервые изучено влияние критических флуктуаций при СФП в решетке на ИЭ. Результат носит общий характер вне зависимости от выбора модели для СФП и определяется критическим индексом γ для восприимчивости решетки при СФП.

С помощью решения нелинеаризованных уравнений Элиашберга на действительной оси рассчитана температурная зависимость для термодинамической щели в электронном спектре. Показано, что в трех возможных случаях эти параметры ведут себя качественно по разному.

Представляет новизну предложенный простой метод определения температуры сверхпроводящего перехода из линеаризованных уравнений Элиашберга на мнимой оси.

Практическая ценность.

Полученные результаты можно использовать для экспериментальной проверки эффектов, предсказываемых ангармонической моделью ВТСП. Отметим, что зависимость ИЭ от концентрации примеси в $\text{La}_{2-x}(\text{Sr,Ba})_x\text{CuO}_4$ была предсказана в работе [1] еще до ее экспериментального обнаружения.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. В рамках феноменологической теории Ландау предсказана температурная зависимость мягких мод ω_1 и ω_2 для последовательности всех четырех фаз, наблюдаемых в купрате лантана с примесями.

2. Рассчитана зависимость фактора ИЭ α от концентрации примеси при наличии СФП типа "смещения". Предсказан скачок α в точке СФП. Указано на связь между ИЭ для T_c и для температуры СФП T_0 .
3. Рассчитана зависимость фактора ИЭ от концентрации примеси при наличии СФП типа "порядок-беспорядок". Найдено качественное совпадение результатов для СФП типа "порядок-беспорядок" и "смещения". Указана причина скачка фактора ИЭ - изменение знака производной восприимчивости ангармонических колебаний в точке СФП.
4. Предсказано совпадение ИЭ для T_c и T_0 в области критических флуктуаций для СФП в случае, если критический индекс для восприимчивости решетки $\gamma < 1$, и равенство $\alpha = 0.5$ в случае $\gamma > 1$.
5. Предсказана различная температурная зависимость сверхпроводящей щели в электронном спектре в трех различных случаях $T_c < T_0$, $T_c > T_0 > 0$ и $T_c > T_0 = 0$.
6. Предложен простой метод численного определения T_c из линеаризованных уравнений Элиашберга на мнимой оси.

Апробация работы.

Представленные результаты докладывались автором на международном семинаре "Ангармонические эффекты в медно-оксидных сверхпроводниках" (г.Блед, 1-6 сентября 1994 г., Словения), на тематических семинарах физики твердого тела в ЛТФ ОИЯИ, а также на семинарах в институте атомной энергетики (г.Обнинск).

Публикации.

По материалам диссертации опубликовано 6 работ.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из Введения, пяти глав, Приложения и Заключения. Общий объем диссертации - 115 страниц. Она содержит 24 рисунка и библиографический список из 115 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во Введении дается краткий обзор экспериментальных данных, свидетельствующих о важности электрон-фононного взаимодействия для объяснения свойств ВТСП, и о возможности традиционного ферми-жидкостного подхода к электронному спектру в новых сверхпроводниках. Здесь же приводится краткий обзор диссертации и формулируются положения, выносимые на защиту.

В первой главе изучается последовательность четырех фаз НТТ(D_{4h}^{17}) → LTO(D_{2h}^{18}) → LTO2(D_{2h}^{19}) → LTT(D_{4h}^{16}) в допированном соединении La_2CuO_4 . Вычисляется температурная зависимость частоты мягких мод ω_1 и ω_2 , ответственных за упомянутые СФП. Глава состоит из двух разделов.

В разделе 1.1 определяются параметры порядка Q_1 и Q_2 для рассматриваемой последовательности СФП и поясняется их физический смысл. Результирующие смещения атомов во всех трех низкотемпературных фазах представляются как линейная комбинация параметров Q_1 и Q_2 . На основе единого термодинамического потенциала, предложенного J.D. Ахе, изучается температурная последовательность СФП. Обсуждаются условия, при которых реализуется СФП первого рода LTT-LTO без промежуточной LTO2 фазы.

В 1.2 рассчитывается температурная зависимость мягких мод колебаний $\omega_1 = \omega(\mathbf{q}_1)$ и $\omega_2 = \omega(\mathbf{q}_2)$ ($\mathbf{q}_{1,2} = \frac{\pi}{a}(\pm 1, 1, 0)$ - в НТТ фазе), а также сами моды (тип колебаний октаэдров CuO_6). Для этих целей вычисляется в полярном представлении матрица обратных статических восприимчивостей для параметров порядка $\frac{\partial^2 F}{\partial Q_i \partial Q_j} = (\chi^{-1})_{ij}$, и ее собственные значения и собственные вектора. Изучается случай зажатых (высокочастотных) восприимчивостей, когда деформация не в состоянии следовать за флуктуациями параметров порядка, и свободных (низкочастотных) восприимчивостей, когда деформация успевает следовать за флуктуациями параметров порядка. Показывается, что мягкие моды являются вырожденными в НТТ фазе (благодаря поворотной оси симметрии z четвертого порядка), а во всех низкосимметричных

фазах вырождение снимается. Частота этих мод не обращается в нуль при температуре СФП LTO2-LTT, если восприимчивости для мягких мод рассматриваются как зажатые. Выясняется причина этого – линейная связь между соответствующим параметром порядка и деформацией в LTT фазе. Аналогичные расчеты выполняются для теоретически возможной последовательности фаз НТТ → LTT → LTO2 → LTO.

Результаты этой главы опубликованы в работе [4].

Во второй главе рассматривается ИЭ в рамках ангармонической модели сверхпроводника с мягкой ротационной модой типа “качания”, феноменологически описанной в гл.1 и ответственной за СФП НТТ-LTO в соединениях $La_{2-x}(Sr,Ba)_xCuO_4$. Глава состоит из пяти разделов.

В разделе 2.1 приводятся экспериментальные данные по аномальному поведению ИЭ в допированном купрате лантана, а также различные подходы к теоретическому объяснению этого поведения.

Раздел 2.2 посвящен изучению сверхпроводящих свойств электрон-фононной системы с линейным по смещениям ионов электрон-фононным взаимодействием и произвольной решеточной частью гамильтониана. Приводятся выражения для функции Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$, содержащей полные функции Грина ионной подсистемы, и для постоянной электрон-фононного взаимодействия $\lambda = \eta\chi$, где η – параметр Хопфильда, χ – усредненная по зоне Бриллюэна восприимчивость решетки. Для вычисления температуры сверхпроводящего перехода T_c используется аппроксимационная формула Кресина:

$$T_c = \tilde{\omega} f(\lambda), \quad (1)$$

где $f(\lambda) = \frac{1}{4} \left(\exp\left(\frac{2}{\lambda}\right) - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}$, $\tilde{\omega}$ – средняя квадратичная частота фононного спектра.

В 2.3 рассматривается микроскопическая модель СФП НТТ-LTO. Для этого с помощью локальной нормальной координаты вводится гамильтониан решетки, представляющий собой совокупность локальных ангармонических осцилляторов, связанных между собой гармоническим взаимодействием. Для получения спектра воз-

буждений и равновесного значения параметра порядка используется метод самосогласованных фононов, что приводит к СФП типа "смещения". В приближении среднего поля получается самосогласованное уравнение для мягкой моды колебаний и температуры СФП T_0 .

Раздел 2.4 посвящен расчету ИЭ. Показывается, что в отличие от случая гармонических колебаний, наличие структурного перехода приводит к зависимости λ и $\tilde{\omega}$ от частоты мягкой моды колебаний, которая, в свою очередь, зависит от температуры и массы изотопа: $\lambda = \lambda(\Omega_0(T, M))$, и $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}(\Omega_0(T, M))$, поэтому выражение (1) для температуры сверхпроводящего перехода становится самосогласованным уравнением для определения T_c :

$$T_c = \tilde{\omega}(T_c) f(\lambda(T_c)). \quad (2)$$

При этом максимальное значение T_c будет соответствовать точке пересечения фазовых кривых $T_c(x)$ и $T_0(x)$ на фазовой T - x диаграмме. Показывается, что в классическом пределе высоких температур СФП существенного влияния на ИЭ не оказывает, в то время как в квантовом пределе низких температур это влияние существенно и может приводить к значениям $\alpha > 0.5$. Приводятся численные расчеты α . На границе СФП фактор ИЭ испытывает скачок, что соответствует наблюдаемому ИЭ в $\text{La}_{2-x}(\text{Sr, Ba})_x\text{CuO}_4$.

В 2.5 кратко обсуждаются полученные в гл.2 результаты. Указывается на связь между изотопическим сдвигом для температуры СФП $T_0(x)$ и изотопическим фактором α .

Материал гл.2 опубликован в работе [2].

Третья глава посвящена изучению ИЭ в модели сверхпроводника со СФП типа "порядок-беспорядок". Глава содержит четыре раздела.

В разделе 3.1 обосновывается необходимость рассмотрения различных приближений для описания СФП, в частности, используемого в этой главе двухуровневого приближения, приводящего к СФП типа "порядок-беспорядок".

Раздел 3.2 содержит описание рассматриваемой электрон-фононной системы. Для микроскопического описания динамики ангармонической моды колебаний используется полученный в гл.2 ре-

шеточный гамильтониан. Двухуровневое приближение получается с помощью проецирования этого гамильтониана на два нижних состояния локального ангармонического осциллятора, что приводит к псевдоспиновому представлению. Обсуждается возможность применимости двухуровневого приближения. Кроме ангармонических, рассматриваются также гармонические колебания решетки с линейным электрон-фононным взаимодействием.

В разделе 3.3 вычисляется температура сверхпроводящего перехода и ИЭ. Необходимая для расчета постоянной λ статическая восприимчивость ангармонических колебаний $\chi_s(T)$ получается в приближении среднего поля. Показывается, что получаемый скачок ИЭ при температуре СФП T_0 является следствием изменения знака производной восприимчивости $\chi_s(T)$ при переходе из высокосимметричной в низкосимметричную фазу. Этот результат основывается на общем выражении (2) для температуры сверхпроводящего перехода и не зависит от сделанных приближений при вычислении динамики решетки.

В 3.4 приводятся результаты численных расчетов для T_c и α , и обсуждаются их свойства. Предполагается, что влияние примеси сводится к изменению квадрата неустойчивой в гармоническом приближении моды колебаний, а параметр Хопфильда остается постоянным. ИЭ вычисляется из разности $T_c(^{18}\text{O}) - T_c(^{16}\text{O})$. Найдено качественное совпадение полученных в этой главе результатов с расчетами гл.2.

Результаты этой главы опубликованы в [3].

В четвертой главе на примере точно решаемой модели СФП исследуется влияние критических флуктуаций в окрестности СФП на ИЭ. Глава состоит из четырех разделов.

Раздел 4.1 представляет собой краткое введение в четвертую главу с обзором ее содержания.

В разделе 4.2 изучается вклад мягкой моды колебаний в постоянную электрон-фононного взаимодействия и в выражение для T_c . Показывается, что приближение Мак-Миллана (усреднение статической восприимчивости по зоне Бриллюэна) качественно верно учитывает вклад мягкой моды Ω_0 . При этом выражение для постоянной λ линейно по Ω_0 в первом порядке по Ω_0 в общем случае,

независимо от выбора модели СФП. Для учета вклада мягкой моды колебаний в выражение для T_c используется точное выражение для T_c через λ и моменты $\langle \omega^{2n} \rangle$ по распределению $\frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$. Показывается, что разложение T_c по Ω_0 квадратично при малых Ω_0 . Вместо формулы Кресина используется формула Комбеску, обладающая этой качественной особенностью.

В 4.3 рассматривается точно решаемая модель СФП. Определяется зависимость частоты мягкой моды Ω_0 от температуры и массы изотопа, а также критический индекс γ ($\chi^{-1}(\mathbf{q} = \mathbf{q}_{cr}), \omega = 0) = \Omega_0^2 \sim \left(\frac{T - T_0}{T_0}\right)^\gamma$), равный 2 для этой модели.

В заключительном разделе 4.4 рассматривается ИЭ в области критических флуктуаций. Показывается, что ИЭ в малой окрестности пересечения кривых $T_c(x)$ и $T_0(x)$ на фазовой T-x диаграмме определяется критическим индексом γ . В случае, когда $\gamma < 1$, фактор ИЭ для T_c совпадает с фактором ИЭ для T_0 (т.е. $\alpha = \beta$, где $\beta = -\frac{\partial \ln T_0}{\partial \ln M}$), а в случае $\gamma > 1$ фактор $\alpha = 0.5$ (при пренебрежении кулоновским отталкиванием). Этот результат носит общий характер и не зависит от выбора модели СФП. Приводятся графики зависимости $T_c(x)$ и $\alpha(x)$ для рассматриваемой точно решаемой модели.

Содержание этой главы опубликовано в [1,5].

В пятой главе для гамильтониана ангармонической модели ВТСП, рассмотренного в гл.2, с помощью решения нелинеаризованных уравнений Элиашберга вычисляется температурная зависимость для термодинамической энергетической щели в электронном спектре Δ_0 и отношение $2\Delta_0/T_c$. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 5.1 обосновывается необходимость изучения сверхпроводящей щели и вопросы, связанные с ее анизотропией.

В разделе 5.2 формулируются уравнения Элиашберга на мнимой оси и излагается метод аналитического продолжения на действительную ось электронных функций Грина, предложенный Ф. Марсиглио, М. Шоссманом и Дж. Карботте. Эта процедура является более простой и экономной с точки зрения затрат машинного времени по сравнению с прямым решением нелинеаризованных уравне-

ний Элиашберга на действительной оси. Фононные функции Грина, входящие в эти уравнения, вычисляются в гл.2.

В заключительном разделе 5.3 вычисляется температурная зависимость для термодинамической энергетической щели в электронном спектре Δ_0 и отношение $2\Delta_0/T_c$, которое в теории БКШ равно приблизительно 3.5. Показано, что в трех возможных случаях $T_c < T_0$, $T_c > T_0 > 0$ и $T_c > T_0 = 0$ эти параметры ведут себя по-разному. Приводится также расчет действительной и мнимой части щели $\Delta(\omega)$, нормированной плотности электронных состояний $N(\omega)/N(0)$ для модельного случая эйнштейновского спектра и для $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ (в последнем случае используется экспериментально полученная энергетическая плотность фононных состояний $G(\omega)$).

Результаты этой главы опубликованы в [6].

В Приложении излагается простой метод определения температуры T_c из линеаризованных уравнений Элиашберга на мнимой оси. Вместо традиционно используемого решения задачи на собственные значения для соответствующего оператора задача сводится к изучению асимптотики следа матрицы этого оператора в N-ой степени по N. Для обоснования этого метода используется теорема Фробениуса-Перрона.

Этот метод опубликован в работе [6].

В Заключении кратко сформулированы основные результаты диссертации, которые и выносятся на защиту.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Плакида Н.М., Черный А.Ю., Изотопический эффект в модели сверхпроводника со структурным фазовым переходом, *ТМФ* 84, 120-127 (1990).
2. Плакида Н.М., Черный А.Ю., О влиянии структурного фазового перехода на изотопический эффект в La_2CuO_4 , *Сверхпроводимость: ФХТ* 4, 1493-1502 (1991).

3. Cherny A.Yu., and Galbaatar T., The Influence of an Order-Disorder Type Structural Phase Transition on the Isotope Effect, *Physica C* **210**, p.35-41 (1993).
4. Cherny A.Yu., Soft Modes and Structural Phase Transitions in La_2CuO_4 , *Physica C* **244**, p.129-134 (1995).
5. Черный А.Ю., Влияние структурного фазового перехода на сверхпроводящее спаривание, *Препринт ОИЯИ Р17-95-191* (1995) (направлено в ТМФ).
6. Черный А.Ю., О влиянии структурного фазового перехода на сверхпроводящую щель в электронном спектре, *Препринт ОИЯИ Р17-95-190* (1995) (направлено в *Сверхпроводимость: ФХТ*).

Рукопись поступила в издательский отдел
28 июня 1995 года.