

УДК 535.33; 537.312; 538.945  
PACS number(s): 74.62.Fj; 74.25.Gz; 74.25.Kc

## КОНСТАНТА ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО НАДПРОВІДНИКА $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$

Я. Довгий

Львівський національний університет ім. І.Франка  
вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005 Львів, Україна  
e-mail: dovhyj@ukrpost.net

На підставі аналізу структури і температурних змін фононних спектрів  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  уперше визначено константу електрон-фононної взаємодії  $g$  і показано, що  $\text{Hg}$ -ВТНП є надпровідниками з сильним зв'язком. У фононному спектрі  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  виявлено ділянку частот поблизу  $487 \text{ cm}^{-1}$  ( $60,4 \text{ meV}$ ), що має ознаки “м'якої моди”. Основний парціальний внесок у функцію густини фононних станів у цій ділянці спектра дають коливання атомів  $\text{O}(2)$ .

*Ключові слова:* фононні спектри,  $\text{Hg}$ -ВТНП, константа електрон-фононної взаємодії, м'яка мода.

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

У статті вперше визначено константу електрон-фононної взаємодії високотемпературного надпровідника  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$ .

Автори [2] вивчили тонку структуру рентгеноабсорбційних спектрів (XAFS – спектрів)  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  ( $T_c=96 \text{ K}$ ) на предмет виявлення динамічних кореляцій (або антикореляцій) на зв'язках  $\text{Cu-O}(2)$  та  $\text{Ba-O}(2)$  (див. рис. 1). За аналізом цієї структури показано, що при  $T=80 \text{ K}$  зміщення атомів  $\text{Cu}$  та аксіальних атомів  $\text{O}(2)$ , а також атомів  $\text{Ba}$  та атомів  $\text{O}(2)$  є антикорельовані. Це означає, що у виразі для середньоквадратичного відхилення атомів  $a$  і  $b$

$$\sigma_{ab}^2 = \sigma_a^2 - \sigma_b^2 - 2\sigma_a\sigma_b\Phi, \quad (1)$$

параметр кореляції  $\Phi$  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. Справді, дослідження спектрів комбінаційного розсіювання  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  показали, що  $A_{1g}$ -мода має дві складові ( $A_{1g}$ - дублет), і це зумовлене особливістю коливань O(2). Основний пік  $A_{1g}$ - дублета відповідає  $592 \text{ cm}^{-1}$ , а менш інтенсивний –  $570 \text{ cm}^{-1}$  [3]. Отже, маємо два можливих положення атомів O(2), що зумовлені локальним перерозподілом заряду. Цей чинник може стосуватися й механізму спарювання носіїв в  $\text{CuO}_2$ -шарах. До речі, вказаний  $A_{1g}$ -дублет, як з'ясувалося [4], особливо чутливий до тиску.

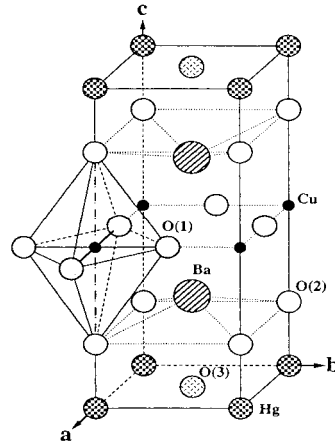


Рис. 1. Кристалічна структура  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  (Hg-1201).  
Вакансії кисню відповідають положення O(3)

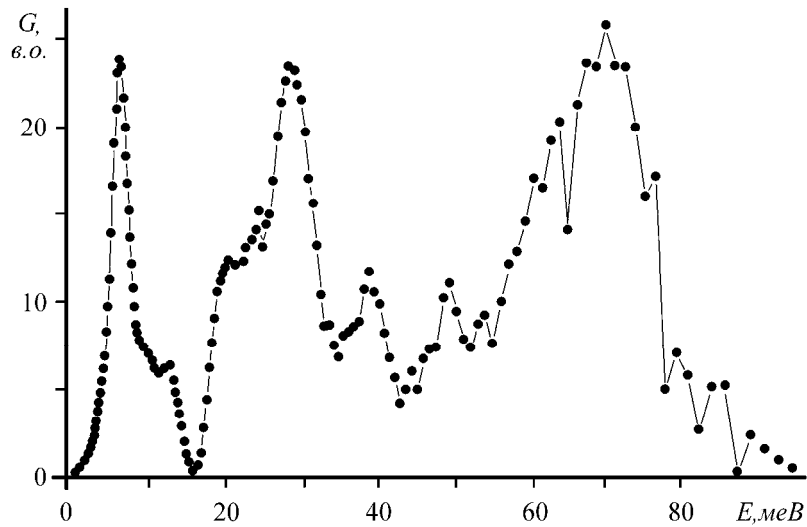


Рис. 2. Функція фононної густини станів  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  за кімнатної температури

На підставі 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. Використовувався монокінетичний пучок нейтронів з енергією 17 меВ. Інтенсивність розсіювання реєструвалась в кутовому діапазоні  $23^\circ < \alpha < 99^\circ$ , що за відомої методики обробки результатів забезпечувало охо-

плення значного об'єму імпульсного простору та отримання надійних значень густини фононних станів  $G(E)$ .

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

На рис. 3 зіставлено експериментальний спектр  $G(E)$  з результатами модельних розрахунків. Силкові константи та інші параметри для обчислень були взяті з огляду [7], в якому проаналізовано великий масив експериментальних даних щодо надпровідних оксидних купратів.

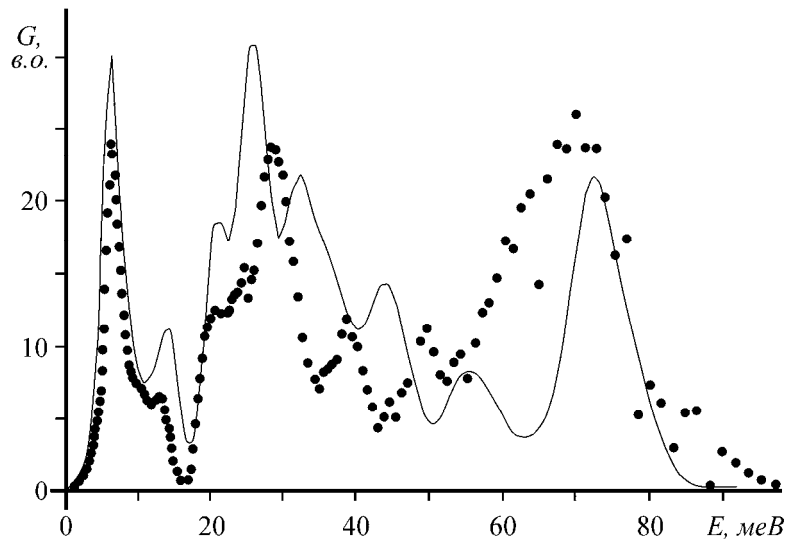


Рис. 3. Порівняння експериментального спектра (точки) з результатами модельних розрахунків (суцільна лінія)

Як видно з рис. 3, експериментальні та розрахункові спектри  $G(E)$  якісно узгоджуються. Розбіжність у високоенергетичній ділянці пояснюють впливом дефектності реальних керамічних зразків. Чіткі піки поблизу 28 ( $226 \text{ cm}^{-1}$ ) і 70 меВ ( $565 \text{ cm}^{-1}$ ) відповідають  $TO$ - та  $LO$ -модам вершинного кисню, причому ці моди є характерними для  $\text{Hg}$ -ВТНП з різною кількістю  $\text{CuO}_2$ -шарів в елементарній комірці.

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

На рис. 4 показані 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 ( $487 \text{ cm}^{-1}$ ) спостерігаються суттєві зміни спектра при охолодженні зразка до температури переходу у надпровідний стан. В інших ділянках спектр не зазнає помітних температурних змін.

Отож, мода 60,4 меВ в  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  виявляє певні ознаки “м’якої моди”. Зміни поблизу  $487 \text{ cm}^{-1}$  доводять, що в цьому діапазоні частот найбільший внесок в  $G(E)$  дають

колювання O(2) і що ця мода може пов'язуватися з переходом із нормальної у надпровідну фазу. Нема припущення підтверджується у роботі [10], де автори спостерігали аналогічні температурні зміни при дослідженні раманівських спектрів Hg-ВТНП. М'яку моду колювань Cu-O(2) була виявили також автори [11] при дослідженні оптимально допованих зразків HgBa<sub>2</sub>CuO<sub>4+y</sub>.

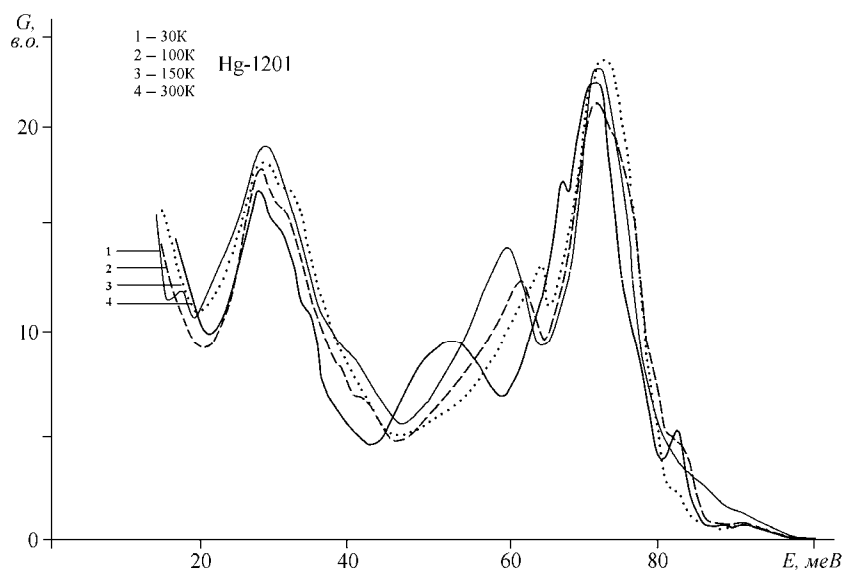


Рис. 4. Температурні зміни фонових мод HgBa<sub>2</sub>CuO<sub>4+y</sub>

За аналогією з YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> ми допускаємо, що енергетична щілина HgBa<sub>2</sub>CuO<sub>4+y</sub>

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

звідки

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

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

Для оцінки величини константи електрон-фононої взаємодії  $g$  використаємо формулу Аллена-Дайнса [12, 13] у рамках моделі сильного зв'язку:

$$T_c \approx \frac{3}{4} \frac{f_1 f_2}{\hbar} \omega_a \frac{\hbar \mu}{k} \exp \left[ -\frac{\hbar}{k} \frac{1,04(1+g)}{g - \mu^*(1+0,62g)} \right] \tag{4}$$

де

$$f_1 = \frac{\hbar}{k} + (g/a_1)^2 \frac{\hbar}{B}; \tag{5}$$

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

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

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

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

$\mu$  – параметр, що характеризує кулонівське відштовхування носіїв;  $\omega_D$  – дебаєвська частота;  $k$  – стала Больцмана.

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

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

Якщо взяти до уваги, що

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

а параметр модифікованого кулонівського потенціалу згідно з [14] дорівнює

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

то після громіздких обчислень одержуємо

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

Отож, можна стверджувати, що ртутевмісні високотемпературні надпровідники характеризуються сильним електрон-фононим зв'язком. Пошук закономірностей зміни параметра  $g$  залежно від кількості  $\text{CuO}_2$ -шарів в елементарній комірці буде предметом наших подальших досліджень.

1. Довгий Я.О. Баричні залежності критичних температур високотемпературних надпровідників (Огляд) // Укр. фіз. журн. 2001. Т. 46. № 5–6. С. 585–596.
2. Booth C.H., Bridges F., Bauer E.D., Li G.G. et al. XAFS measurements of negatively correlated atomic displacements in  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // Phys. Rev. 1995. Vol. B52. N 22. P. 15745–15748.
3. Lee H.G., Shin H.S., Yang I.S., Yu J.J. et al. Raman-spectroscopy investigations of Hg-HTSC // Physica C. 1994. Vol. 233. P. 35–47.
4. Yang I.-S., Shin H.-S., Lee H.-G. Micro-Raman study of the role of pressure in mercury-based superconductors // Phys. Rev. 1995. Vol. B51. N 1. P. 644–647.
5. Renker B., Schober H., Gompf F. Lattice dynamics and electron-phonon coupling in superconducting  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  investigated by inelastic neutron scattering // J. Low. Temp. Phys. 1996. Vol. 105. N 3,4. P. 843–848.
6. Renker B., Gompf F., Ewert D., Adelman P. et al. Changes in the phonon spectra of Bi 2212 superconductors connected with the metal-semiconductor transition in the series of  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2(\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x)\text{Cu}_2\text{O}_8$  compounds // Z. Phys. 1989. Vol. B77. N 1. P. 65–68.
7. Chaplot S.L., Reichardt W., Pintschovius L., Pyka N. Common interatomic potential model for the lattice dynamics of several cuprates // Phys. Rev. 1995. Vol. B52. N 10. P. 7230–7242.
8. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников / Под ред. Д. Гинзбурга. М.: Мир, 1990. 543 с.
9. Zeyher R., Zwicknagl G. Superconductivity-induced phonon self-energy effects in high- $T_c$  superconductors // Z. Phys. 1990. Vol. B78. N 2. P. 175–190.

10. *Krantz M.C., Thomsen C., Mattausch H.J., Cardona M.* Raman-active phonons and mode softening in superconducting  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Phys. Rev.* 1994. Vol. B50. N 2. P. 1165–1170.
11. *Uchiyama H., Baron A.Q.R., Tsutsui S.* et al. Softening of Cu-O Bond Stretching Phonons in Tetragonal  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. N 19. 197005 p.
12. *Allen P.B., Dynes R.C.* Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed // *Phys. Rev.* 1975. Vol. B12. N 3. P. 905–922.
13. *Довгий Я.О.* Чарівне явище надпровідності. Монографія. Л.: Євросвіт, 2000. 440 с.
14. *Radousky H.B., Jarlborg T., Knapp G.S., Freeman A.J.* Assessment of theoretical determinations of the electron-phonon coupling parameter  $\lambda$  in metals and intermetallic compounds // *Phys. Rev.* 1982. Vol. B26. N 3. P. 1208–1222.

**THE ELECTRON-PHONON INTERACTION CONSTANT OF HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTOR  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$**

**Ya. Dovhyj**

*Ivan Franko Lviv National University, Physical Department  
Kyryla and Mefodia Str., 8, UA-79005 Lviv, Ukraine  
e-mail: dovhyj@ukrpost.net*

For the first time on the basis of analysis of structure and temperature changes of  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  phonon spectra the electron-phonon interaction constant  $g$  has been determined and it is shown, that Hg-HTSC are superconductors with the strong coupling. In the  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  phonon spectrum it is established that the frequencies range near  $487 \text{ cm}^{-1}$  ( $60,4 \text{ meV}$ ) shows signs of “soft mode”. The main partial contribution in the density of phonon states in that spectral range is given by O(2) atoms vibrations.

*Key words:* phonon spectra, Hg-HTSC, electron-phonon interaction constant, soft mode.

**КОНСТАНТА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СВЕРХПРОВОДНИКА  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$**

**Я. Довгий**

*Львовский национальный университет им. И.Франко  
ул. Кирилла и Мефодия, 8, 79005 Львов, Украина  
e-mail: dovhyj@ukrpost.net*

На основании анализа структуры и температурных изменений фоновых спектров  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  впервые определена константа электрон-фононного взаимодействия  $g$  и показано, что Hg-ВТСП являются сверхпроводниками с сильной связью. В фоновом спектре  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+y}$  обнаружен участок частот вблизи  $487 \text{ см}^{-1}$  ( $60,4 \text{ мэВ}$ ), который имеет признаки “мягкой моды”. Основной парциальный вклад в функцию плотности фоновых состояний в данном участке спектра дают колебания атомов O(2).

*Ключевые слова:* фоновые спектры, Hg-ВТСП, константа электрон-фононного взаимодействия, мягкая мода.

Стаття надійшла до редколегії 01.02.2008  
Прийнята до друку 20.07.2009