

ДЕФОРМАЦИОННЫЕ АНОМАЛИИ В СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА La_2CuO_4

И.М. Сулов

Деформационные аномалии в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-1-3}$ объясняются наличием на уровне Ферми ван-хововской особенности и указывают на существование мягкой моды, не связанной со структурным переходом.

При выяснении механизма высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях на основе La_2CuO_4 естественно обращать внимание на те явления в них, которые отсутствуют в обычных сверхпроводниках. К числу таковых относятся обнаруженные в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при $x = 0, 15$ ромбические искажения, возникшие при 180 К в результате структурного перехода, испытывают резкое уменьшение при 70 К⁻¹. При $x = 0,2$ переход в ромбическую фазу отсутствует, но параметры решетки c и a резко меняются в интервале 20–90 К, причем отношение c/a имеет минимум при температуре сверхпроводящего перехода²; аналогичное уменьшение c/a наблюдается в интервале 95–110 К для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-1-3}$. Ниже показано, что такие аномалии являются следствием наличия на уровне Ферми ван-хововской особенности.

Седловая точка в двумерном электронном спектре сопровождается особенностью плотности состояний

$$N(E) = \frac{1}{v_0 J} \ln \frac{1}{|E - E_0|} + \text{const} \quad (1)$$

v_0 – объем элементарной ячейки. При совпадении уровня Ферми μ с E_0 система подвержена неустойчивостям типа пайерлсовской: при $\mu = \text{const}$ и $T = 0$ ввиду наличия в термодинамическом потенциале Ω сингулярности $\alpha \epsilon^2 \ln |\epsilon|$ с $\alpha > 0$ (ϵ – расстояние от особенности до границы заполненных состояний) выгодно, затратив энергию $\beta \epsilon^2 / 2$, создать деформацию решетки: a – сдвигающую особенность с уровня Ферми; b – раскрывающую на нем щель; c – расщепляющую особенность на две части⁴. В эксперименте¹⁻³, по-видимому, реализуется случай a , т.к. он не требует изменения кристаллической симметрии; этот тип неустойчивости требует для поддержания условия $\mu = \text{const}$ достаточно большой const в (1) – “резервуара”.

При повышении температуры деформационная неустойчивость ликвидируется за счет размытия фермиевского распределения путем фазового перехода второго рода, т.к. разложение Ω по ϵ не содержит нечетных степеней ввиду локальной симметрии вблизи особенности:

$$\Omega_N(\epsilon) = \Omega_0 + A \frac{T - T_D}{T_D} \epsilon^2 + \frac{1}{2} B \epsilon^4. \quad (2)$$

В случае (a) $-A = 1/2 v_0 J$, $B = 7\zeta(3) / 24 \pi^2 v_0 J T_D^2$, $T_D \sim \mu e^{-\beta v_0 J}$.

Деформационная неустойчивость может ликвидироваться и при понижении температуры за счет сверхпроводящей щели Δ , если $\Delta \gtrsim \epsilon$; выполнение этого условия в сверхпроводниках класса La_2CuO_4 возможно ввиду больших Δ и жесткой решетки. Для описания этого явления воспользуемся разложением Гинзбурга–Ландау

$$\Omega_S(\epsilon, \Delta) = \Omega_N(\epsilon) + a(\epsilon) \frac{T - T_c(\epsilon)}{T_D} \Delta^2 + \frac{1}{2} b(\epsilon) \Delta^4, \quad (3)$$

с коэффициентами, зависящими от ϵ . Считая T_c и T_D близкими, можно положить $a(\epsilon) = a$, $b(\epsilon) = b$, $T_c(\epsilon) = T_c(1 - \epsilon^2/\omega^2)$ и использовать для $\Omega_N(\epsilon)$ разложение (2). Из равенства нулю производных Ω по Δ и ϵ получим четыре группы решений, которые по аналогии с ⁵ будем называть N , D , S и SD -фазами:

$$N: \epsilon^2 = 0, \Delta^2 = 0; \quad D: \epsilon^2 = A(1-t)/B, \Delta^2 = 0 \quad (4)$$

$$S: \epsilon^2 = 0, \Delta^2 = a(t_c - t)/b; \quad SD: \epsilon^2 = p(t^* - t), \Delta^2 = q(t^{**} - t),$$

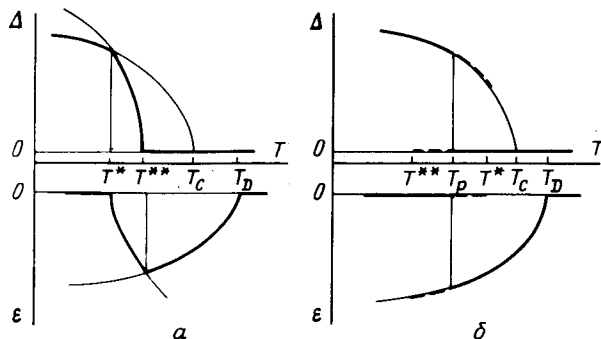
где $p = (Ab - a\gamma)/(Bb - \gamma^2)$, $q = (aB - A\gamma)/(Bb - \gamma^2)$ (5)

$$t^* = \frac{Ab - a\gamma t_c}{Ab - a\gamma}, \quad t^{**} = \frac{aB t_c - A\gamma}{aB - A\gamma}, \quad t = \frac{T}{T_D}, \quad t_c = \frac{T_c}{T_D}, \quad \gamma = \frac{at_c}{\omega^2}.$$

Для определенности считаем $T_D > T_c$; обратный случай получается перестановкой ϵ и Δ . Исследование устойчивости решений (4) приводит к следующим результатам: 1) $Bb < \gamma^2$, $Ab > a\gamma$, $aB < A\gamma$: при $t > 1$ устойчива N -фаза, при $t < 1 - D$ -фаза; 2) $Bb < \gamma^2$, $Ab < a\gamma$, $aB > A\gamma$: при $t > 1$ устойчива N -фаза, при $t_p < t < 1 - D$ -фаза, при $t < t_p - S$ -фаза; S и D -фазы метастабильны при $t_p < t < t^*$ и $t^{**} < t < t_p$ соответственно; использовано обозначение.

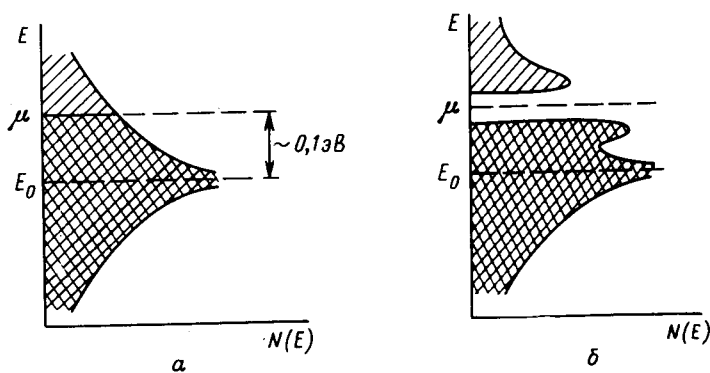
$$t_p = (t_c - A\sqrt{b}/a\sqrt{B})/(1 - A\sqrt{b}/a\sqrt{B});$$

3) $Bb < \gamma^2$, $Ab < a\gamma$, $aB < A\gamma$: при $t > 1$ устойчива N -фаза, при $t < 1 - D$ -фаза, S -фаза метастабильна при $t < t^*$; 4) $Bb > \gamma^2$, $Ab > a\gamma$, $aB > A\gamma$: при $t > 1$ устойчива N -фаза, при $t^{**} < t < 1 - D$ -фаза, при $t < t^{**} - SD$ -фаза; 5) $Bb > \gamma^2$, $Ab > a\gamma$, $aB < A\gamma$: то же, что в случае 1); 6) $Bb > \gamma^2$, $Ab < a\gamma$, $aB > A\gamma$: при $t > 1$ устойчива N -фаза, при $t^{**} < t < 1 - D$ -фаза, при $t^* < t < t^{**} - SD$ -фаза, при $t < t^* - S$ -фаза.



В случае 4) поведение деформаций следует работе ¹, в случае 6) (рис. 1а) – работе ²; в случае 2) (рис. 1б) – работе ³. Влияние деформаций существенно изменяет термодинамику сверхпроводников – изменяются отношение $2\Delta(0)/T_c$, зависимость $H_c(T)$, возникают дополнительные скачки теплоемкости (аномалия теплоемкости при 80 К в $\text{La}_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_4$, соответствующая точке T_D , наблюдалась в ⁶);

Расчеты зонной структуры La_2CuO_4 ⁷ показывают, что уровень Ферми лежит в центре квазидвумерной зоны шириной 4 эВ, хорошо описываемой приближением сильной связи, небольшая асимметрия которой приводит к тому, что ван-хововская особенность лежит на $\sim 0,1$ эВ ниже уровня Ферми (рис.2а). В $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ уровень Ферми понижается и при $x \sim 0,1$ проходит через ван-хововскую особенность: соответственно, в зависимости $T_c(x)$ наблюдается максимум при $x = 0,15$ ⁸. Интерпретация осложняется наличием ромбических искажений, приводящих к дизлектризации спектра и дополнительному максимуму в $N(E)$ (рис.2б), которым также можно объяснить максимум в $T_c(x)$ ⁵. Однако, тот факт, что при $x = 0,2$ ромбические искажения отсутствуют, а T_c мало отличается от максимального, указывает на определяющую роль ван-хововской особенности. Результаты ³ указывают на существование ван-хововской особенности и в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.



Оценивая a и b в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ по скачку теплоемкости $\Delta C \sim 5 \text{ мДж/см}^3\text{К}$ ⁹ и соотношению БКШ $\Delta = 3,06 \sqrt{T_c(T_c - T^*)}$ и определяя по спектру ⁷ $I \approx 5$ эВ, получим возможность удовлетворения неравенств для случаев 4) и б) при соответствующем выборе величины ω . Полагая $T^* = 20 \text{ К}$, $T^{**} = 40 \text{ К}$, $T_D = 80 \text{ К}$ для $x = 0,2$ и $T_D = 70 \text{ К}$ для $x = 0,15$, получим соответственно $\omega \sim 500 \text{ К}$ и $\omega \gtrsim 700 \text{ К}$, что находится в разумном согласии с оценкой по теории БКШ

$$\omega = T_c \left[\frac{8\pi^2 \ln \frac{\mu}{T_c}}{7\zeta(3)} \right]^{1/2} \sim 400 \text{ К} ,$$

Из сказанного ясно, что близость ван-хововской особенности к уровню Ферми не только увеличивает плотность состояний, но и создает мягкую фоннную моду. В $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ частота этой моды обращается в нуль соответственно при температурах 70–90К и 110 К, близость которых к T_c благоприятна для увеличения константы электрон-фонного взаимодействия.

Автор признателен В.В. Мошалкову, А.И. Головашкину и К.В. Мицену за ознакомление с экспериментальными результатами и обсуждение.

Литература

1. D. Mc K. Paul et al, Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1976.
2. Брандт Н.Б. и др. Материалы Всесоюзного рабочего совещания по высокотемпературной сверхпроводимости, Свердловск, 1987.
3. Головашкин А.И. и др. Письма в ЖЭТФ, в печати.
4. Rice T.M., Scott C.K. Phys. Rev. Lett., 1975, 35, 120.
5. Конаев Ю.В. и др. ЖЭТФ, 1970, 58, 1012; 1973, 65, 1984.
6. Dunlap B.D. et al, Phys. Rev. B, 1987, 35, 7210.
7. Mattheiss L.F. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1028.

8. *van Dover R.B. et al. Phys. Rev. B, 1987, 35, 5337*

9. *Batlog B. et al. Phys. Rev. B, 1987, 35, 5340.*

● Физический институт им. П.Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
21 сентября 1987 г.