

О МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ПРИРОДЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ВТСП

*В.М.Бурлаков, Н.Ю.Болдырев, И.Гайдук,
К.В.Крайская, А.Г.Митько*

Детально исследованы спектры отражения ряда образцов состава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ в области частот аксиального колебания ($500 - 800 \text{ см}^{-1}$). На основании анализа особенностей спектра $\epsilon''(\omega)$ предлагается микроскопическая модель электрон-фононного взаимодействия, суть которой заключается в модулировании аксиальными смещениями мостикового кислорода коэффициента гибридизации электронных состояний купратных плоскостей с квазилокализованными состояниями цепочек $\text{Cu} - \text{O}$.

Недавно проведенные ИК исследования фононных спектров поликристаллических образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ со значительным дефицитом кислорода ¹⁻³ выявили ряд особенностей, последовательный анализ которых позволяет установить конкретный механизм электрон-фононного (ЭФ) взаимодействия в этих соединениях.

Этими особенностями являются: 1) возрастание интегральной интенсивности аксиального колебания $\omega = 600 \text{ см}^{-1}$ в образце с $x = 6,3$ при понижении температуры; 2) наличие резонанса Фано этого же колебания с электронным континуумом в образце с $x = 6,6$ ($T_c = 10 \text{ К}$).

Первая особенность объяснялась в ² локализацией носителей заряда на ионах, участвующих в аксиальном колебании. Действительно, только изменением эффективного заряда иона удастся объяснить наблюдавшееся изменение интегральной интенсивности. Необычным в такой интерпретации является соотношение небольшой характерной энергии Δ – рис. 1 (ей соответствует характерная температура изменения I_{Σ} , $T \sim 0,02 \text{ эВ}$) и малого радиуса локализации (порядка радиуса иона). Последнему должна была бы соответствовать энергия $\sim 1 \text{ эВ}$. Для устранения противоречия необходимо было предположить, что локализация носителей заряда происходит в результате туннельного перехода под барьером высотой $\sim 1 \text{ эВ}$ ². Схематически эта ситуация представлена на рис. 1.

Ниже будет показано, что основываясь на схеме рис. 1 и учитывая модуляцию потенциального барьера аксиальными смещениями ионов (вероятнее всего мостикового кислорода) относительно купратной плоскости, можно с единых позиций объяснить все обнаруженные в ^{2,3} и настоящей работе спектральные особенности. Нас будет интересовать, главным образом,

описание резонанса Фано в области аксиального колебания и зависимость константы ЭФ взаимодействия от содержания кислорода x .

Для анализа спектра поглощения по аналогии с ^{4, 5} рассмотрим гамильтониан H_{int} взаимодействия фононов Q и носителей заряда в купратных плоскостях a_B^+, a_B и цепочках a_L^+, a_L с внешним электромагнитным полем E и учтем, что зонные (B) состояния плоскостей и квазилокальные (L) состояния цепочек перекрываются за счет туннелирования сквозь потенциальный барьер. Коэффициент перекрытия (туннелирования) $\alpha(Q)$ зависит от ширины и высоты барьера и, следовательно, от мгновенного значения фононной координаты аксиальной моды Q . С учетом сказанного

$$H_{int} = \Sigma(\alpha_0 + \alpha_1 Q)(a_B^+ a_L + \text{к.с.}) + AEQ + \Sigma BE a_B^+ a_B + \Sigma CE a_L a_L^+, \quad (1)$$

где $A, B,$ и C – матричные элементы дипольных переходов. После диагонализации квадратичной части (1) имеем

$$H_{int} = AEQ + \Sigma \tilde{B} E \tilde{a}_B^+ \tilde{a}_B + \Sigma \tilde{C} E \tilde{a}_L^+ \tilde{a}_L + \Sigma \beta Q \tilde{a}_B^+ \tilde{a}_B + \Sigma \gamma Q \tilde{a}_L^+ \tilde{a}_L + \Sigma \delta Q (\tilde{a}_B^+ \tilde{a}_L + \tilde{a}_L^+ \tilde{a}_B), \quad (2)$$

где новые параметры в (2) выражаются через параметры H_{int} (1).

Спектр поглощения в области фононных частот имеет вид

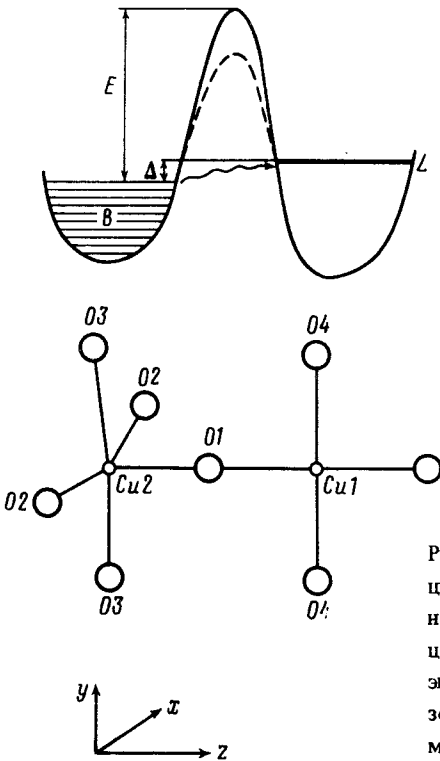


Рис. 1. Схематическое изображение решеточного потенциала в z -направлении. B – зонные состояния купратной плоскости, L – квазилокализованные состояния цепочки, E – потенциальный барьер, Δ – разность энергии локального уровня и энергии вырождения зоны купратной плоскости. Пунктиром обозначена модуляция барьера при аксиальных колебаниях

$$I = \text{Im} \{ (\tilde{A}^2 G_B^{-1} - 2\tilde{A}\tilde{B}\beta + \tilde{B}G_Q^{-1}) (G_Q^{-1}G_B^{-1} - \beta^2)^{-1} \}. \quad (3)$$

Здесь G_B и G_Q – электронная и фононная функции Грина, $\tilde{A}^2 = A^2 - A\tilde{C}\gamma G_B$ – перенормированная интенсивность фонона, (3) записано с учетом того, что спектр возбуждений L -но-

сителей лежит значительно выше по шкале частот, чем спектр возбуждений решетки. В случае $\bar{B} = 0$ (образец с $x = 6,3$ в ²) выражение (3) описывает температурную зависимость интегральной интенсивности фоновой полосы, обнаруженную в ². Эта зависимость заключена в коэффициенте $C \sim n_L$, где n_L — число заполнения L -состояний. В случае $B = 0$ (3) описывает появление резонанса Фано в образцах с $x = 6,6 - 6,7$ — рис. 2. Из рисунка видно, что модель

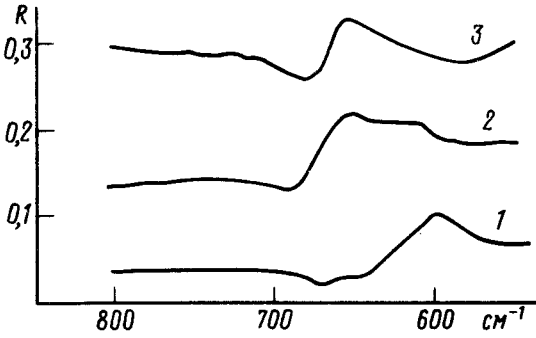


Рис. 2. Спектры отражения образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$: 1 — $x = 6,4$; 2 — 6,6; 3 — 6,7. (Содержание кислорода определялось по частоте линии КР. $\omega \sim 500 \text{ см}^{-1} - \text{см}^{-1}$)

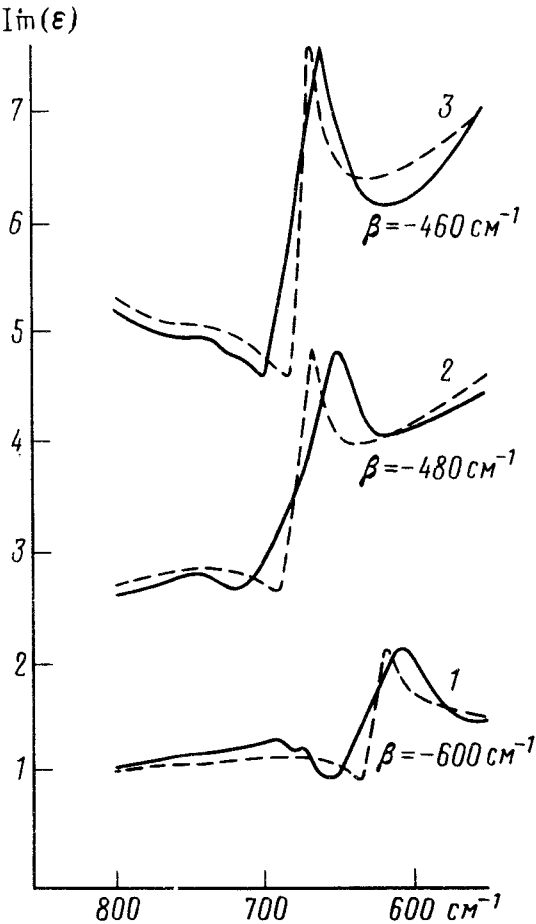


Рис. 3. Спектры $\epsilon''(\omega)$, рассчитанные из спектров отражения аналогично ¹⁻³. Пунктир — модельная аппроксимация на основании (3) (см. текст). Параметры модельной аппроксимации: кривая 1 — $\beta = -600 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{\text{фон}} = 585 \text{ см}^{-1}$, кривая 2 — $\beta = -480 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{\text{фон}} = 670 \text{ см}^{-1}$, кривая 3 — $\beta = -460 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{\text{фон}} = 670 \text{ см}^{-1}$

качественно верно описывает спектр $\epsilon''(\omega)$. Константа ЭФ взаимодействия в изученных в настоящей работе образцах слабо зависит от содержания кислорода (концентрации носителей). Это, однако, не означает слабую зависимость эффективного электрон-электронного притяжения от концентрации носителей, так как последнее зависит еще от числа заполнения локаль-

ных уровней, т.е. от соотношения энергии локального уровня и энергии вырождения зонных носителей.

В заключение заметим, что обсуждавшийся резонанс Фано в монокристаллических образцах будет проявляться только в наклонной поляризации, когда вектор электрического поля составляет некоторый угол, не равный 0 и $\pi/2$, с базовой плоскостью. Это связано с ортогональностью дипольных моментов переходов аксиального колебания и внутренних переходов в базовой плоскости.

Литература

1. Бурлаков В.М. и др. СФХТ, 1989, 2, 125.
2. *Burlakov V.M. et al.* Physics Lett. A, 1989, 142, 514.
3. *Burlakov V.M. et al.* J. Mol. Structure, 1990, 219, 153.
4. *Langreth N.* Phys. Rev. Lett., 1985, 54, 126.
5. *Chahal Y.J.* Phys. Rev. Lett., 1985, 55, 845.

Институт спектроскопии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
5 июня 1990 г.