

# POTENCIALES ANARMÓNICOS E INTERACCIÓN ELECTRÓN-FONÓN EN EL COMPUESTO $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

S. Koval,

Instituto de Física Rosario, Boulevard 27 de Febrero 210 Bis, (2000) Rosario, Argentina.

A. Greco

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstr. 1, D-7000 Stuttgart 80, Germany.

Resolvemos a través de la técnica de diagonalización exacta de Lanczos un modelo de Peierls-Hubbard para las cadenas Cu-O más oxígenos apicales en  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . Estudiamos los modos Raman e infrarrojo asociados al desplazamiento de los oxígenos apicales en la dirección z y calculamos el potencial adiabático efectivo para cada modo en la aproximación de "fonones congelados". Para el modo infrarrojo y a un acoplamiento crítico  $\lambda_c = 1.1$ , aparece un potencial tipo doble pozo a través de un mecanismo de transferencia de carga efectiva entre oxígenos apicales acoplado a la distorsión. Por otra parte, para el modo Raman se observa un potencial esencialmente armónico con un corrimiento del mínimo del mismo a medida que la distorsión aumenta. Estudiamos el comportamiento del acoplamiento crítico en función de los parámetros del modelo y de la concentración de agujeros del sistema. Se analizan estos resultados contrastándolos con los datos experimentales y con otros modelos teóricos anteriormente utilizados<sup>1,2</sup>.

Recientemente ha habido cierto interés en la cuestión de si el oxígeno apical se mueve o no en un potencial doble pozo. Básicamente existen dos enfoques:

1- Experimentalmente, las mediciones de estructura fina de absorción de rayos-x (XAFS)<sup>1</sup> son interpretadas a través de la existencia de un doble pozo para el movimiento de los oxígenos apicales. Modelos teóricos como diagonalización exacta de fonones dinámicos y electrones en el cluster O(4)-Cu(1)-O(4) arrojan comportamientos pola-rónicos de los portadores que conducen en un cierto régimen de parámetros del acoplamiento electrón-fonón a la aparición de potenciales tipo doble pozo (por lo menos para ciertos fonones como el infrarrojo)<sup>2</sup>.

2- Por otro lado, experimentos de "scattering" de luz no muestran evidencias de tal doble pozo<sup>3</sup> y cálculos de acoplamiento fuerte de la interacción electrón-fonón reproducen bien la autoenergía de fonones en el centro de zona<sup>4</sup>. Como discusión reciente ver Ref. (5) y (6).

En este trabajo nos proponemos analizar usando el método de diagonalización exacta de "Lanczos" los modos infrarrojo y Raman en la cadena  $[\text{CuO}_3]$  con condiciones periódicas de contorno (ver Fig. 1a y 1b).

Consideramos el siguiente Hamiltoniano para la cadena  $[\text{CuO}_3]$  donde los fonones son tratados en la aproximación de "fonones congelados"

(aproximación adiabática):

$$H = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij}(u_k) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i, \sigma} e_i n_{i\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_k \frac{1}{2} K u_k^2 \quad (1)$$

donde,  $n_{i, \sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  es el número de agujeros con spin  $\sigma$  en el sitio  $i$  que puede tener un Cu o un O (orbitales  $d$  y  $p$ ). Se toma solamente repulsión Co-ulombiana  $U_d$  en el sitio del Cu (para el oxígeno  $U_d = 0$ ). El "hopping" Cu-O a primeros vecinos es modificado por los desplazamientos iónicos  $u_k$  para cada fonón considerado de la siguiente forma:  $t_{ij} = t_{pd} \pm \alpha u_k$ , donde el signo + (-) se aplica en el caso de que la ligadura se acorte (alargue).

Se considera el siguiente conjunto de parámetros de referencia  $U_d = 10.5 \text{ eV}$ ,  $\Delta = e_p - e_d = 3.6 \text{ eV}$  y  $t_{pd} = 1.3 \text{ eV}$ <sup>7,8</sup>.

Se define la siguiente constante de acoplamiento electrón-fonón adimensional:  $\lambda = \alpha^2 / K t_{pd}$ .

El número de holes en el "cluster" de dos celdas de la cadena es fijado en principio en  $n=3$  para el caso  $\delta = 0$  que corresponde a 1.5 holes por celda en concordancia con lo que se estima de cálculos de estructura de bandas<sup>9</sup>. Para  $\delta = 0.5$  (1) se consideran  $n=2$  (1) holes en todo el "cluster" considerado. De esta forma podemos analizar el efecto del dopaje que no se pudo hacer con el modelo de Ref. (2). Además

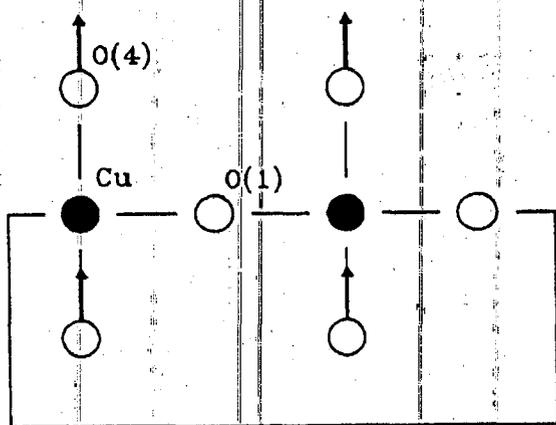


Fig. 1a: Desplazamientos iónicos en el modo infrarrojo (el desplazamiento del ión Cu es inapreciable).

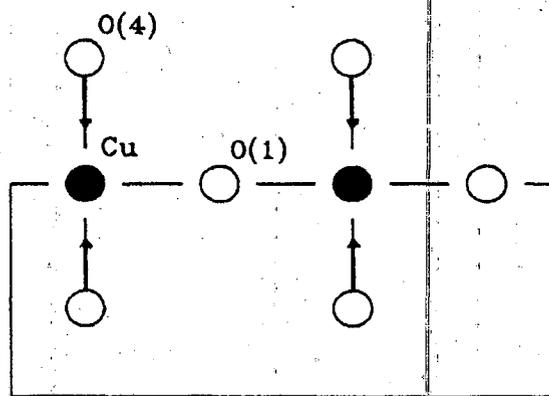


Fig. 1b: Desplazamientos iónicos en el modo Raman.

preferenciamos el efecto de covalencia en la interacción electrón-fonón, lo cual es razonable para los modos considerados<sup>10</sup> mientras que en Ref. (2) se considera la interacción con términos diagonales electrónicos. Por otro lado, se ha demostrado que la aproximación adiabática es correcta<sup>11</sup>, y conduce a las mismas predicciones espectroscópicas del tratamiento dinámico de los fonones<sup>2</sup>.

En Fig. 2 mostramos la energía total en función de la distorsión de la red para el modo infrarrojo. Se observa una estructura de doble pozo a partir de  $\lambda = 1.1$ . Para  $K \approx 28.3 \frac{eV}{\text{\AA}^2}$  que lleva al valor experimental de la frecuencia del modo infrarrojo y  $\lambda = 1.14$  tenemos una separación entre mínimos del potencial de  $0.13 \text{\AA}$  cercano al valor experimental<sup>1</sup>,

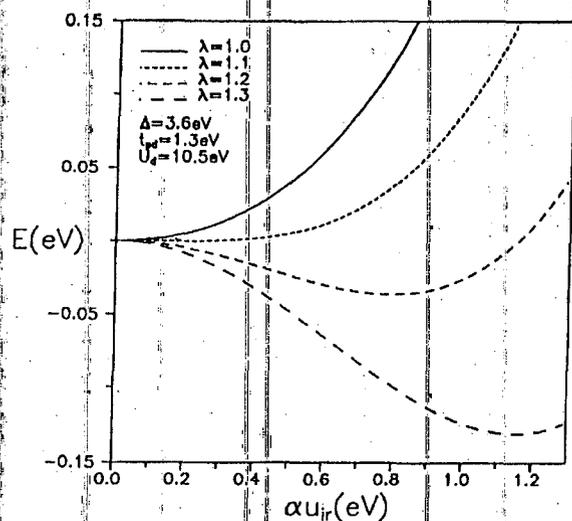


Fig. 2: Energía de la red vs. distorsión de la misma según el modo infrarrojo para distintos acoplamientos.

pero la altura de la barrera es mucho más baja  $\approx 0.01 eV$  que la medida. Hemos calculado también para las otras concentraciones de oxígeno  $\delta = .5$  y  $\delta = 1.$ , observándose la aparición del doble pozo pero para acoplamientos críticos mayores que en el caso metálico.

En Fig. 3 vemos la densidad de agujeros en diferentes sitios como función de la distorsión infrarroja. Se observa un mecanismo de transferencia de carga efectiva entre oxígenos apicales acoplado a la distorsión que produce la aparición del potencial doble pozo.

En Fig. 4 mostramos la energía según la distorsión Raman. Contrariamente al caso infrarrojo, se observa un comportamiento esencialmente armóni-

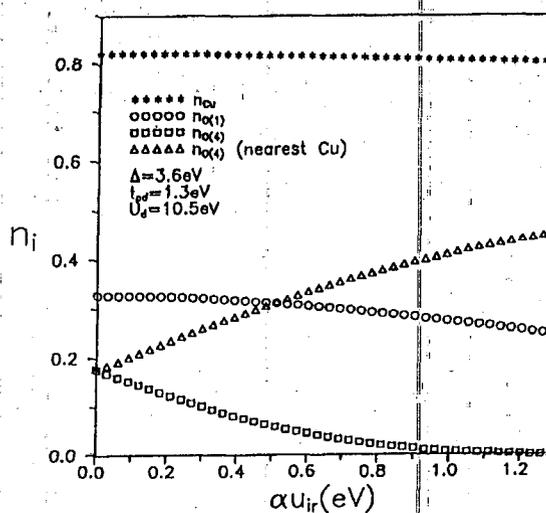


Fig. 3: Número medio de huecos por celda para cada sitio vs. distorsión de la red según el modo infrarrojo.

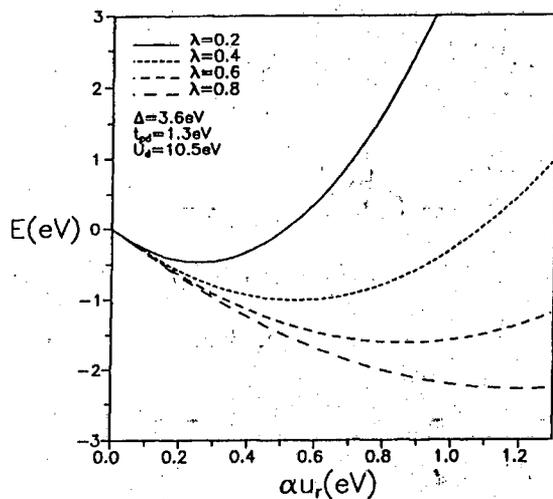


Fig. 4: Energía de la red vs. distorsión de la misma según el modo Raman para distintos acoplamientos.

co con un corrimiento en la energía a medida que la distorsión aumenta. Para otras concentraciones  $\delta = .5$  y  $\delta = 1$ , el mínimo de energía está situado a una mayor distorsión que el caso metálico (menor distancia Cu(1)–O(4)).

En Fig. 5 observamos las densidades en función de la distorsión Raman. En este caso la transferencia de carga es entre el oxígeno apical y el de

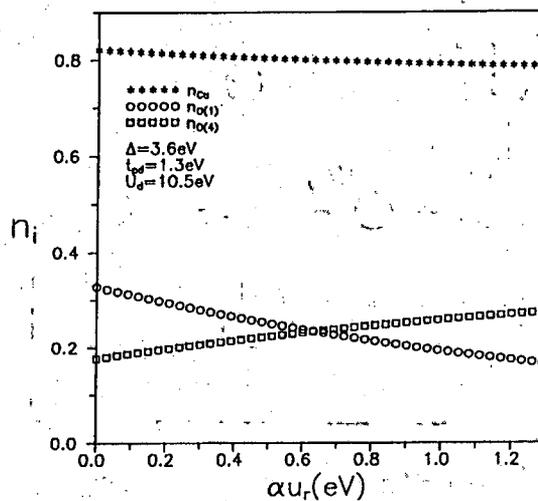


Fig. 5: Número medio de huecos por celda para cada sitio vs. distorsión de la red según el modo Raman.

la cadena.

En las Fig. 6a, 6b y 6c mostramos el acoplamiento crítico en función de la variación  $U_d$ ,  $\Delta$  y  $t_{pd}$  respectivamente y para diferentes concentraciones de agujeros. Vemos que  $\lambda_c$  no es muy sensitivo para los dos primeros parámetros mientras que sí lo es para  $t_{pd}$  (indicando la importancia de la transferencia de carga como mecanismo de formación del

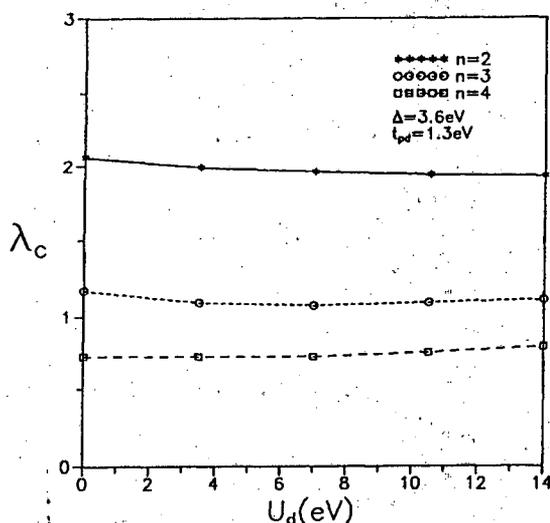


Fig. 6a: Acoplamiento crítico para la aparición del doble pozo en el modo infrarrojo en función del parámetro de repulsión fuerte en el sitio del Cu para distintas cantidades de agujeros en el "cluster" considerado.

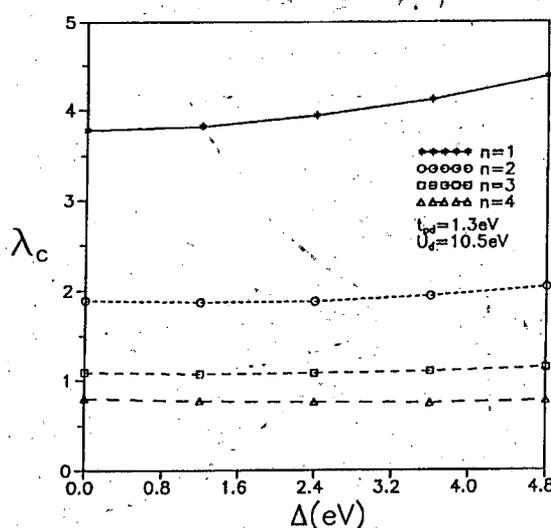


Fig. 6b: Acoplamiento crítico para la aparición del doble pozo en el modo infrarrojo en función del parámetro diferencia de energías de sitio entre oxígeno y Cobre ( $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d$ ) para distintas cantidades de agujeros en el "cluster" considerado.

doble pozo). También es sensitivo a la concentración de portadores y por ende a la cantidad de oxígeno. Observamos también la aparición de un doble pozo cuando no hay correlación ( $U_d = 0$ ).

Finalmente, podemos emitir las siguientes conclusiones:

- El modelo planteado conduce a la aparición de un potencial efectivo tipo doble pozo para el modo infrarrojo aunque no se puede concluir que el "tamaño" del mismo sea similar al observado experimentalmente<sup>1</sup>.

- Se necesita la inclusión de un "hopping" efectivo Cu(1) - O(1) menor debido a la pérdida de oxígenos en la cadena para entender el aumento de la distancia entre mínimos del potencial doble pozo con el incremento de  $\delta$ . Desde esta hipótesis, no es necesario correlacionar la frecuencia de tunelaje directamente con la temperatura crítica del sistema como fue especulado en Ref. (1).

- La estructura de doble pozo aparece debido al acoplamiento de la transferencia de carga a lo largo del eje c acoplada a la distorsión del modo infrarrojo y el acoplamiento crítico depende esencialmente del parámetro de "hopping"  $t_{pd}$ .

- La estructura doble pozo de obtiene aún sin correlaciones con un acoplamiento similar.

- Los valores de  $\lambda_c$  corresponde al régimen de acoplamiento fuerte.

- Para el modo Raman se observa un comportamiento esencialmente armónico con un corrimiento del mínimo de la energía a medida que el acoplamiento crece.

- La distorsión es también producida por la pérdida de oxígeno pero es inconsistente con la variación experimental de la distancia Cu(1) - O(4)<sup>12</sup>, revelando la importancia de la interacción con los planos Cu(2) - O(2,3).

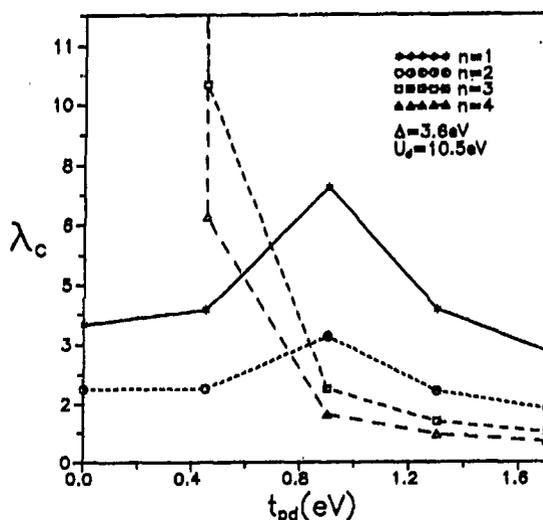


Fig. 6c: Acoplamiento crítico para la aparición del doble pozo en el modo infrarrojo en función del parámetro de "hopping" para distintas cantidades de agujeros en el "cluster" considerado.

- A medida que la distorsión Raman aumenta, la transferencia de carga ocurre entre los oxígenos apicales y los de la cadena.

## REFERENCIAS

1. J. Mustre de Leon *et al.*, Phys. Rev. Lett. **63**, 1675 (1990); J. Mustre de Leon *et al.*, Phys. Rev. **B44**, 2422 (1991).
2. J. Mustre de Leon *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3236 (1992).
3. R. Zeyher and G. Zwicknagl; Z. Phys. **B78**, 175 (1990).
4. C. Thomsen y M. Cardona, "Physical Properties of High-temperature Superconductors" ed. D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1990).
5. C. Thomsen and M. Cardona, Phys. Rev. **B47**, 12320 (c) (1993).
6. J. Mustre de Leon *et al.*, Phys. Rev. **B47**, 12322 (c) (1993).
7. M. S. Hybertsen *et al.*, Phys. Rev. **B39**, 9028 (1989).
8. Mc. Mahan A. *et al.*, Phys. Rev. **B38**, 6650 (1988); Mila F., Phys. Rev. **B38**, 11358 (1988).
9. W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. **61**, 433 (1989).
10. Barisic S., Int. Journ. Mod. Phys. **B5**, 2439 (1991).
11. Koval S., Gazza C., Migoni R. y Ceccatto H., aún no publicado.
12. R. J. Cava *et al.*, Phys. **C156**, 523 (1988); A. Renault *et al.*, J. of Sol. State Chrm. **71**, 587 (1987).