

POSIBLE ROL DE LA FLUCTUACIÓN DE CARGA DEL Cu EN LA SUPERCONDUCTIVIDAD DE ALTA TEMPERATURA CRÍTICA

A. Greco

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. Universidad Nacional de Rosario, Instituto de Física Rosario, Bv. 27 de Febrero 210 Bis.

Uno de los hechos conocidos en los superconductores de alta temperatura crítica es que el Cu puede fluctuar entre diferentes estados de carga. Por otro lado las fluctuaciones de carga pueden producir variaciones de radio iónico que se acoplan con la red.

En este trabajo se plantea un modelo de capas *breathing*, en el cual la coordenada de capas representa las variaciones de radio iónico antes mencionadas. Cuando en el modelo se introducen electrones interaccionando no sólo con los iones rígidos sino también con las variaciones de radio iónico, se generan interacciones efectivas entre electrones. Estas interacciones refuerzan las habituales provenientes de la convencional interacción electrón fonón.

Desde el descubrimiento de la superconductividad de alta temperatura crítica tanto en el La_2CuO_4 ^[1] como en el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}$ ^[2] una variedad de mecanismos se han propuesto con el fin de entender el origen de la alta T_c ^[3].

Con el descubrimiento de superconductividad a T_c similar al La_2CuO_4 en el BaBiO_3 ^{[4],[5]} y su posible explicación dentro de la teoría de interacción electrón-fonón^[6], es razonable pensar que existe un solapamiento de dos mecanismos. Un mecanismo es el convencional de baja temperatura^[7] y el otro es el nuevo de alta T_c .

Es bien conocido que en los nuevos superconductores el Cu puede fluctuar entre diferentes estados de carga^{[8]-[11]}. Muchos autores han considerado que las fluctuaciones de carga podrían llevar a un aumento de T_c ^{[12]-[15]}. Por otro lado, las fluctuaciones de carga producen variaciones de radio iónico las cuales pueden acoplarse con la red^{[16],[17]}.

Tomando como punto de partida las consideraciones mencionada anteriormente, se propuso un modelo de capas *breathing* no lineal^{[18],[19]} y se dio una posible explicación para las anomalías encontradas en el espectro de fonones del La_2CuO_4 ^{[20]-[22]}.

Cuando el material es dopado, los portadores pueden interactuar con la red distorsionada por las fluctuaciones de carga del Cu. Este argumento físico puede ser modelado por el siguiente potencial de un modelo de capas extendido (MCE)^[23]:

$$\Phi = 1/2 \sum_1 \{ F [U_1 + W_1 - U_{1+1} + W_{1+1}]^2 + 1/2 g W_1^2 + E C_1^+ C_1 + t C_1^+ C_{1+1} + t C_{1+1}^+ C_1 + \alpha (U_{1+1} - U_1) C_{1+1}^+ C_1 + \alpha (U_{1+1} - U_1) C_1^+ C_{1+1} + \beta W_1 C_1^+ C_1 \} \quad (1)$$

En cada sitio 1 existe un carozo U con su respectiva coordenada *breathing* W. Esta última será tratada adiabáticamente. C_1^+ y C_1 son variables de Grassman que representan los grados de libertad electrónicos. Los parámetros F y g representan las constantes de fuerza interiónica y capa-carozo respectivamente. E y t son la energía de sitio y la integral de *hopping* de un modelo *tight binding*. El parámetro α es el usual del acoplamiento electrón-fonón. El nuevo parámetro β tiene en cuenta la interacción entre electrones y las fluctuaciones de carga del ión.

La interacción entre electrones y las variaciones de radio iónico es conocida en los compuestos de valencia intermedia. Su efecto en la dinámica puede tenerse en cuenta un modelo de capas *breathing* amortiguado^[17].

La dinámica de la capa es determinada por la condición adiabática:

$$H_0 = \sum_q \left[\varepsilon_q C_q^\dagger C_q + \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q \right] \quad (9)$$

es el Hamiltoniano de fonones y electrones libres. En la expresión (8) el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón es:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial W_1} = F [U_{1-1} - U_{1+1} + 2 W_1 + W_{1+1} + W_{1-1}] + g W_1 + \beta C_1^\dagger C_1 = 0 \quad (2)$$

$$H_{int}^{e-ph} = \sum_{q,q'} i D(q,q') C_{q+q'}^\dagger C_{q'} (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) \quad (10)$$

La coordenada W puede ser despejada de esta condición y reemplazada en el potencial (1). Este potencial en el espacio q es:

con

$$\Phi = \sum_q \left[\frac{1}{2} \omega_q^2 U_q U_{-q} + \varepsilon_q C_q^\dagger C_q + \sum_{q,q'} i V(q,q') C_{q+q'}^\dagger C_q U_{q'} - \sum_{q,q',q''} \lambda(q,q',q'') C_{q''-q'+q} C_{q''} C_q^\dagger C_q \right] \quad (3)$$

$$D(q,q') = V(q,q') \left(\frac{\hbar}{2M \omega_{q'}} \right)^{1/2} \quad (11)$$

y el Hamiltoniano de interacción entre electrones es:

donde

$$\omega_q^2 = M^{-1} \left[2F(1 - \cos qa) + \frac{4F^2 \sin^2(qa)}{(2F+g)+2F \cos qa} \right] \quad (4)$$

$$H_{int}^{e-e} = - \sum_{q,q',q''} \lambda(q,q',q'') C_{q''-q'+q} C_q^\dagger C_q C_{q''} \quad (12)$$

$$\varepsilon_q = E + 2t \cos qa \quad (5)$$

En el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón, $H_0 + H_{int}^{e-f}$, los grados de libertad fonónicos pueden eliminarse^[24] llevando el problema a uno con interacciones efectivas entre electrones con constante de acoplamiento dependiente de la matriz $D(q, q')$. Este es uno de los puntos centrales de la teoría BCS^[7] de los superconductores convencionales de baja temperatura crítica. Además de este término, el modelo tratado en esta sección arroja un término adicional de interacción entre electrones con constante de acoplamiento $\lambda(q, q', q'')$. Esta interacción efectiva pudo explicitarse sólo gracias a la linealidad en W existente en la condición adiabática.

$$V(q, q') = \left[2\alpha [\sin q' a + \sin(q+q') a] + \frac{2f\beta}{(2F+g)+2F \cos qa} \right] \quad (6)$$

$$\lambda(q, q', q'') = \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{(2F+g)+2F \cos(q-q')a} \quad (7)$$

Mientras el tercer término de (3) es de tipo interacción electrón-fonón, el cuarto término es de tipo interacción electrón-electrón. El signo menos en este último indica que la interacción mencionada es atractiva.

Luego de eliminada la coordenada W , el operador Hamiltoniano puede escribirse como:

$$H = H^0 + H_{int}^{e-ph} + H_{int}^{e-e} \quad (8)$$

donde

Cuando $g \rightarrow \infty$ el modelo de capas *breathing* tiende a un modelo de iones rígidos, lo que significa que en este límite las fluctuaciones de carga no se acoplan con la red, este puede ser el caso del BaBiO₃. Las expresiones (7) y (6) tienden a cero y a la simple interacción electrón-fonón respectivamente en el límite mencionado. Ahora bien, cuando las fluctuaciones de carga se acoplan con la red, tanto V como λ dan una contribución dependiente de las constantes b y g .

En el BaBiO₃ el valor de g debería ser alto y por lo tanto la interacción efectiva entre electrones toma los valores correspondientes a la interacción

electrón-fonón. Por otro lado, en los compuestos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}$ y La_2CuO_4 la fluctuación de carga del Cu se acoplaría con la red más fuertemente que en el BaBiO_3 , lo cual lleva a pensar en un valor de g menor que el existente en éste y, por consiguiente, en la posible contribución de las interacciones efectivas en el aumento de la temperatura crítica. Teniendo en cuenta que $T_c \text{ BaBiO} < T_c \text{ LaCO} < T_c \text{ YBCO}$ es razonable pensar que $g \text{ YBCO} < g \text{ LaCO} < g \text{ BaBiO}$.

Antes de finalizar, es interesante hacer algunos comentarios. Recientemente Overhauser^[25] consideró de importancia para la explicación de la alta T_c la contribución de vibraciones transversales de las capas iónicas. Un análisis físico similar al tratado puede hacerse si en el lugar de un modelo *breathing* se propone un modelo de polarizabilidad. Una de las diferencias a tener en cuenta es que en lugar del último término de (1) debe usarse un término de la forma $\beta (u_1 - v_1) C_1^+ C_1$, el cual representa la interacción de los electrones con la polarizabilidad del ión.

REFERENCIAS

- [1] J. Bednorz and K. Müller, Z. Phys. B64, 189 (1986).
- [2] M. Wu, J. Ashburn, C. Torng, P. Hor, R. Meng, L. Gao, Z. Huang, Y. Wang, and C. Chu, Phys. Rev. Lett. 58, 908 (1987).
- [3] J. Friedel, J. Phys.: Condens. Matter 1, 7757 (1989).
- [4] R. Cava, B. Batlogg, J. Krajewski, R. Farrow, L. Rupp, A. White, K. Short, W. Peck, and T. Kometani, Nature 332, 814 (1988).
- [5] A. Sleight, Science 242, 1519 (1988).
- [6] M. Masafumi, N. Suzuki, and K. Motizuki, J. Phys.: Condens. Matter 2, 3553 (1990).
- [7] J. Schrieffer; "Theory of Superconductivity", W.A. Benjamin, INC. (1964).
- [8] M. Rigney, C. Poole, Jr. and H. Farach, J. Phys. Chem. Solids 50, 9 (1989)
- [9] E. Alp, G. K. Shenoy, D.G. Hinks, D. Capone II, L. Soderholm, H. Schuttler, J. Guo, D. Ellis, P. Montano, and M. Ramanathan; Phys. Rev. B 35, 7199 (1987).
- [10] C.L. Fu and A.J. Freeman; Phys. Rev. B 35, 8861 (1987)
- [11] L. Degiorgi, E. Kaldis and P. Wachter; Physica C 135-155, 657 (1988).
- [12] C. Varma, S. Schmitt-Rink and Elihu Abrahams; Solid State Commun. 62, 681 (1987).
- [13] K. H. Bennemann; Solid State Commun. 67, 431 (1988).
- [14] T. Murao, H. Nakatani and H. Taniyama; J. Phys. Soc. Japan 57, 1551 (1988).
- [15] M. Tachiki and S. Takahashi; Phys. Rev. B 38, 218 (1988).
- [16] H. Pilz, G. Güntherodt, W. Kleppman and W. Kress; Phys. Rev. Lett. 43, 1998 (1979).
- [17] G. Pastor, A. Caro and B. Alascio; Solid State Commun. 56, 497 (1985).
- [18] A. Dobry, A. Greco, R. Migoni, and M. Stachiotti, enviado para su publicación al J. Phys.: Condens. Matter (1991).
- [19] A. Dobry, A. Greco, R. Migoni, and M., Stachiotti, enviado como ICTP Report.
- [20] H. Rietchel, L. Pintschovius and Reichardt; Physica C 162-164, 1705, (1989)
- [21] L. Pintschovius, N. Pyka, W. Reichardt, A. Yu Rumiantsev, A. Ivanov and N. Mitrofanov; Proc. Int. Sem High-Tc Superc; Dubna, USSR, June 1989 (to be published)
- [22] L. Pintschovius in "Phonons 89", Ed. S. Hunklinger, W. Ludwig and G. Weiss. Bol. 1 (World Scientific, 1989), p. 217
- [23] A. Greco and O. Zandron, J. Phys. A: Math.-Gen. 24, 000 (1991).
- [24] H. Frölich, Phys. Rev. 79, 845 (1950)
- [25] Overhauser A. 1990 Phys. Rev. B 42 10130.