

УДК 543.43

В. Д. Борисенко, к. т. н., доц.; В. Г. Борисенко**ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ТА ЕЛЕКТРОННИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛЕВОГО МОНОШАРУ НА ПОВЕРХНІ
ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО НАДПРОВІДНИКА МЕТОДОМ
ФОТОЕЛЕКТРОННОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ З КУТОВОЮ РОЗДІЛЬНОЮ
ЗДАТНІСТЮ
(ОГЛЯД ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ПРАЦЬ)**

Методом фотоemisійної спектроскопії з кутовим розділенням (ARPES або ФЕЕКР) проведено детальне порівняльне дослідження низки YBCO-зразків з різною концентрацією носіїв (від 0,05 до 0,25 дірок на елементарну комірку), легованих киснем і кальцієм. Показано, що фотоemisійний спектр має, як правило, дві складові: металеву та надпровідну, які репрезентують, відповідно, сигнали з першого поверхневого подвійного CuO_2 шару та з об'єму зразка. Шляхом аналізу отриманих спектрів розділено ці об'ємний та поверхневий сигнали й досліджено особливості їх електронних властивостей.

Ключові слова: фотоemisійна спектроскопія, високотемпературні надпровідники, поверхневий сигнал.

Вступ

Фотоemisійна спектроскопія вагомо впливає на сучасні дослідження електронної структури твердих тіл. За допомогою кутового розширення з експериментальних даних можливо отримати топологію Фермі-поверхні, дисперсію квазічастинок, розмір та імпульсний розподіл енергетичних щілин та ін. Широке застосування отримала фотоemisійна спектроскопія у вивченні високотемпературних надпровідників, у яких механізм надпровідності залишається невиявленим. За допомогою ФЕЕКР встановлено анізотропний характер надпровідних енергетичних щілин у купратах, визначено домінуючі чинники, які впливають на динаміку квазічастинок, детально досліджено Фермі-поверхню. Переважну більшість дослідів проведено на так званих BSCCO-купратах, тоді як не менш відомі YBCO-сполуки залишалися майже недослідженими через суттєвий внесок поверхневих станів у фотоemisійний сигнал. Отже, з'являється необхідність розділення поверхневого й об'ємного фотоemisійного сигналу в YBCO-сполуках.

Експеримент

Дані отримано за допомогою стандартного фотоелектронного спектрометра з кутовим розширенням на основі аналізатора SCIENTA SES 100 та високоінтенсивних джерел синхротронного випромінювання BESSY (Німеччина) й SLS (Швейцарія) [1, 2]. Зразки змонтовано на криоманіпуляторі. Атомарно чисту поверхню отримано в ультрависокому вакуумі близько $5 \cdot 10^{-11}$ мБар шляхом механічного розколювання зразків вздовж кристалографічних поверхонь. Усі спектри записано з енергетичним розрізненням 12 меВ та кутовим розділенням $0,2^\circ$. Фермі-рівень прокалібровано по Фермі-краю срібної полікристалічної плівки, яку осаджено на поверхню маніпулятора поряд з вимірюваним зразком. Монокристали YBCO високої якості синтезовано шляхом вирощування з розплаву та насичено киснем до необхідної концентрації. На рис. 1 зображено кристалічну структуру YBCO.

У цій статті наводимо отримані з двох зразків результати: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,85}$ з $T_C = 90$ К та

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$ з $T_C = 35$ К, які були роздвійниковані під дією механічної напруги при підвищенні температури. Також досліджено кілька кристалів з двійниками: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ та $\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{BaCu}_3\text{O}_{7-d}$, з $x = 0,15$ та з $T_C = 90$ та 77 К відповідно.

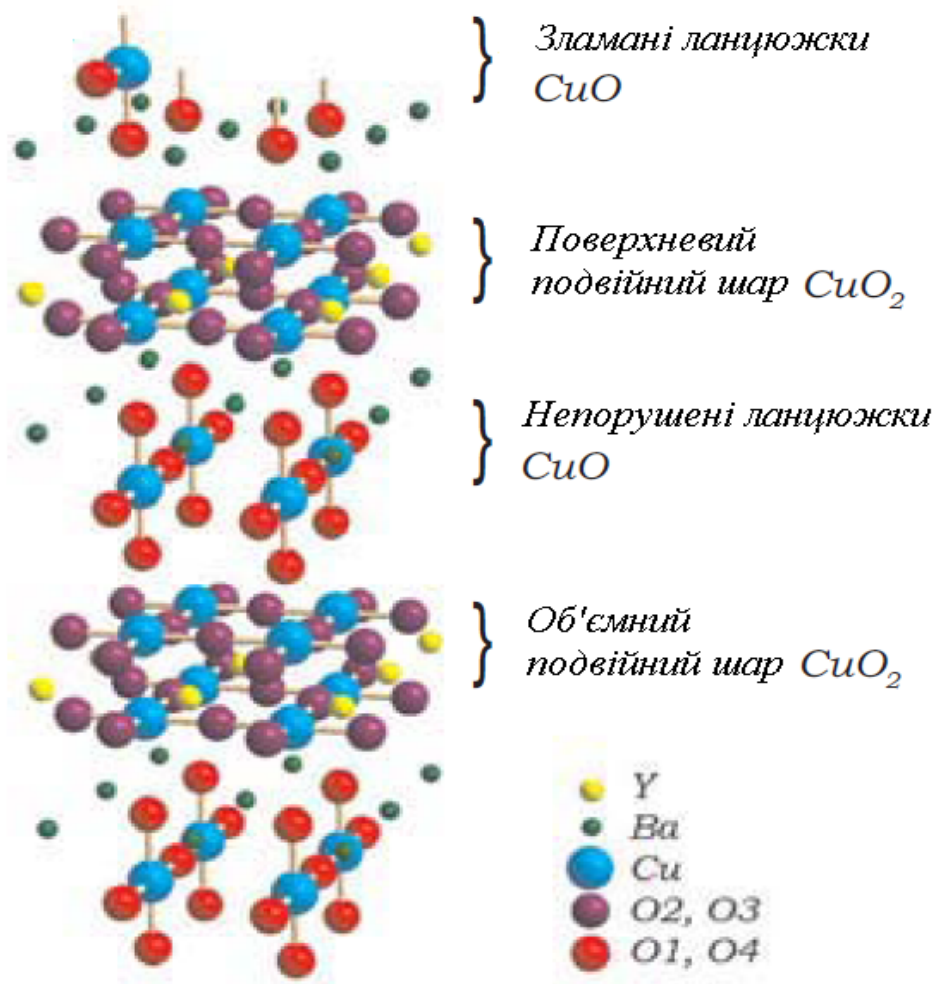


Рис. 1. Кристалічна структура $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-d}$

Результати експерименту

На рис. 2. зображено експериментальну електронну структуру роздвійникованого $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$ з $T_C = 90$ К. Верхня панель містить дві експериментальні мапи Фермі-поверхні (кольорова шкала) виміряних вздовж Γ -Х та Γ -Y напрямків та наближену до них електронну структуру в наближенні сильного зв'язку. На панелях (а)–(h) показано фотоемісійні спектри в різних напрямках зони Бріллюена, які позначені зверху відповідними літерами. Аналогічним чином на рис. 3 наведено дані для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$ з $T_C = 35$ К. На відміну від попередніх фотоемісійних досліджень YBCO [3 – 6], ми використали більш високі енергії фотонів (50 – 60 eV порівняно з 15 – 30 eV), що дозволило суттєво збільшити інтенсивність фотоелектронів та досягну область в імпульсному просторі.

Візуально відповідність між експериментальною та розрахованою [7] електронною структурою видається повною. Є дві діркові Фермі-поверхні навколо S-точок.

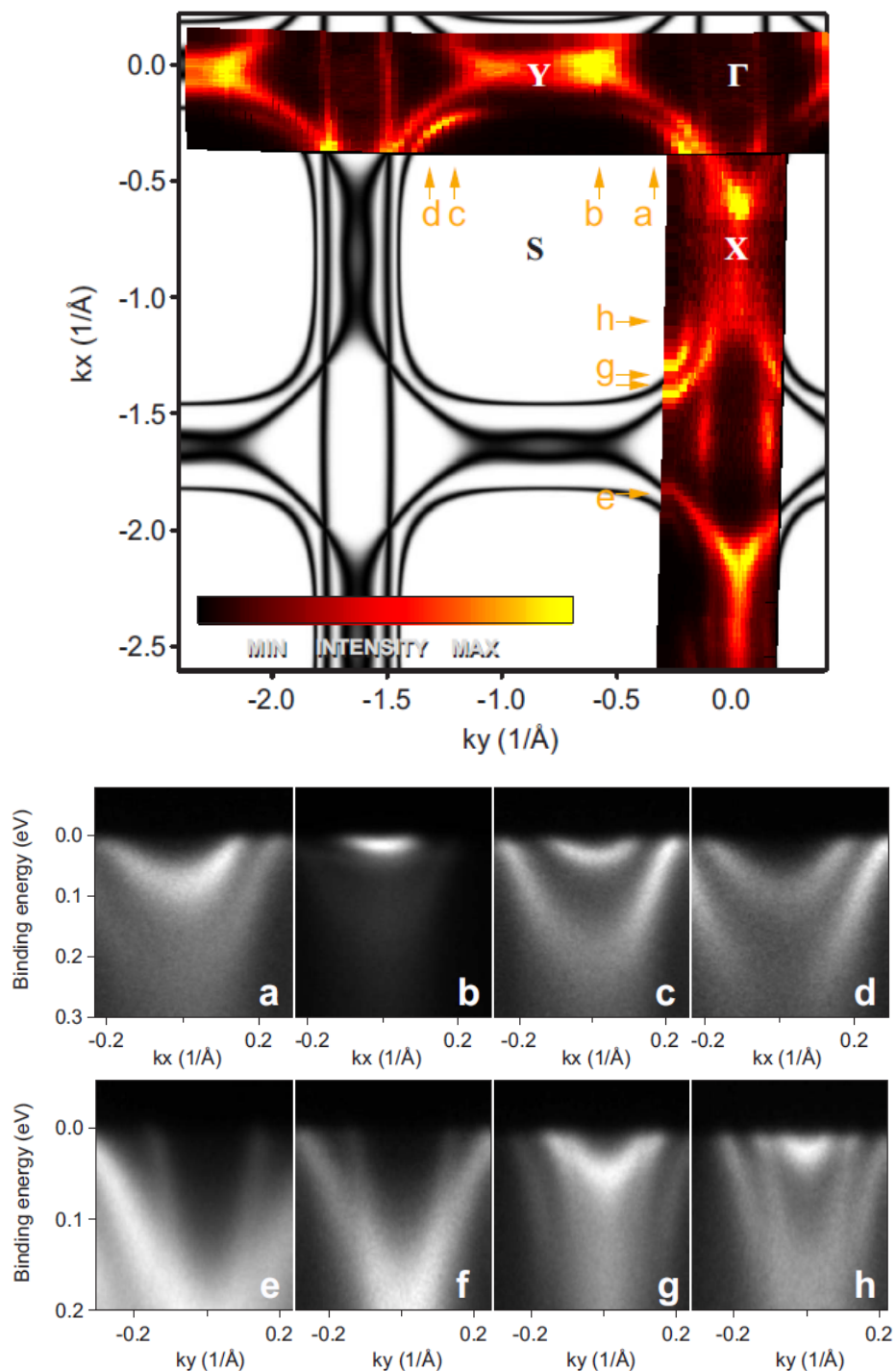


Рис. 2. Експериментальна електронна структура роздвійникового $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$, $T_C = 90$ К

Верхня панель містить дві експериментальні мапи Фермі-поверхні (кольорова шкала), виміряних вздовж $\Gamma - X$ та $\Gamma - Y$ напрямків, і наближену до них електронну структуру в наближенні сильного зв'язку. а – h – фотоемісійні спектри в різних напрямках зони Брілюена, позначені вгорі відповідними літерами.

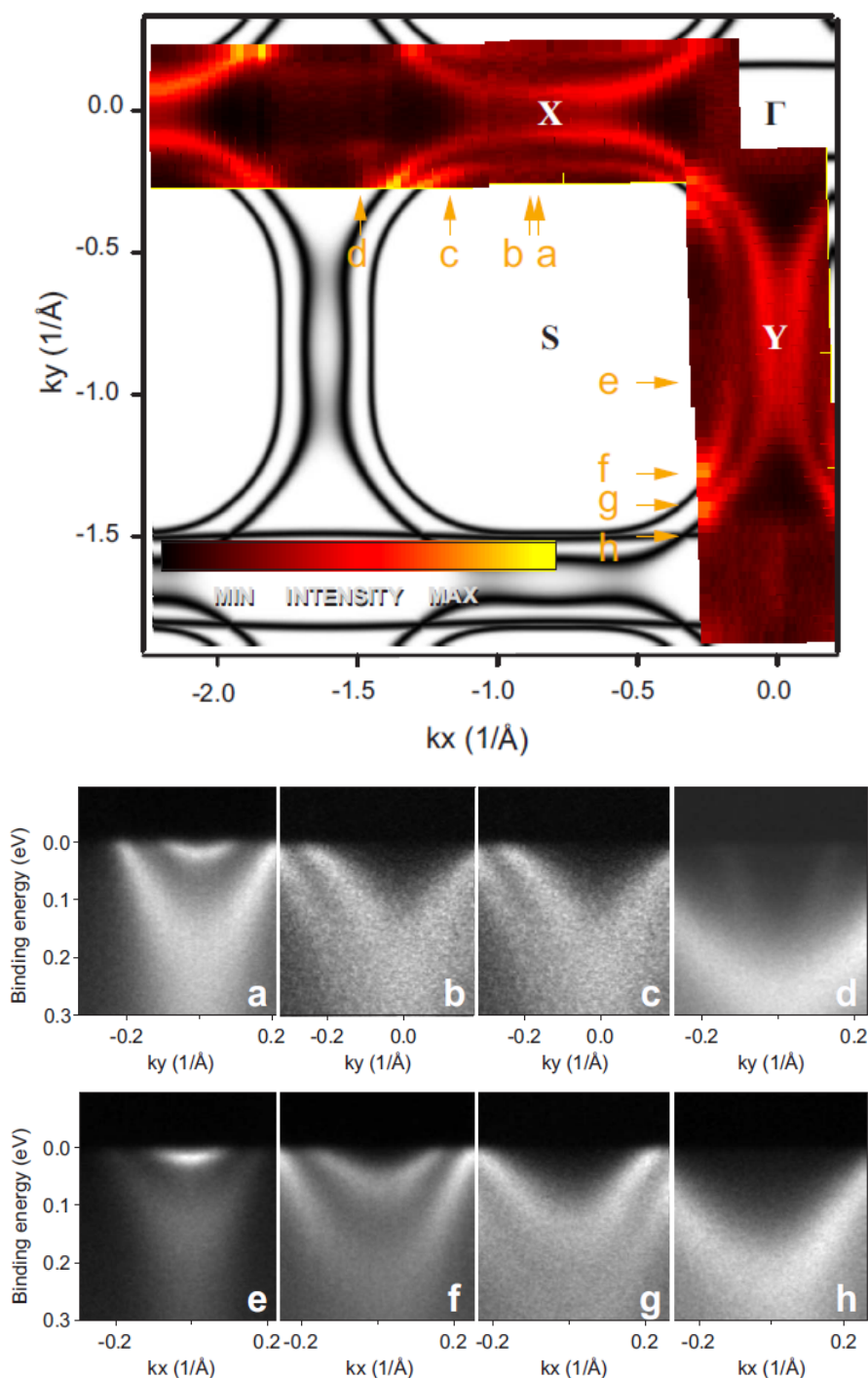


Рис. 3. Подібно до рис. 2, експериментальна електронна структура роздвійникового $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$, $T_c = 35$ К.

Усі дані отримано при $T = 30$ К. (b) – (h) отримано з фотонами з $h\nu = 50$ еВ та лінійною поляризацією, (a) отримано з фотонами з $h\nu = 55$ еВ.

Одновимірна структура вздовж Γ -X напрямку є прямим доказом існування електронних станів, пов'язаних з ланцюжками CuO . Також цікаво, що, на відміну від $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+d}$ [8], розщеплення зони провідності, завдяки наявності двох сусідніх CuO_2 шарів, є більш ізотропним. Отже, можна зробити висновок, що ми знайшли повну відповідність електронної структури YBCO з експериментом і LDA-розрахунком [7] на якісному рівні.

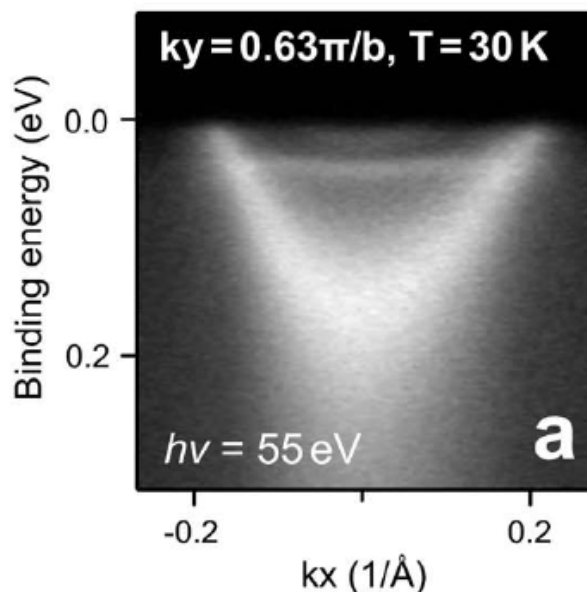
Однак на кількісному рівні є суттєва відмінність, а саме: концентрація носіїв (у цьому

випадку дірок), яка пропорційна площі Фермі-поверхні [9] і становить 0,31. Це значно перевищує величину $x = 0,15$, що очікується для зразка з $T_c = 90$ К. Крім того не спостерігається очікуваної зміни електронної структури (відкриття надпровідної щілини) при зниженні температури нижче T_c . Подальші дослідження також виявили незвичайну структуру, яка з'являється в спектрах при низьких температурах. На рис. 4а цю структуру видно як зону зі слабкою дисперсією на енергії близько 40 меВ.

Рис. 4b пояснює цю "незвичайну" структуру як сильно ренормалізовану зону, що є наслідком як появи вхідної щілини, так і взаємодії з відомим магнітним резонансом [10]. Отже, експериментальний спектр, який показано на рис. 4а, є суперпозицією сигналів від надпровідної (об'ємної) та металевої (поверхневої) складових. Найнижча картинка на рис. 4b репрезентує надпровідний спектр, середня – металевий, верхня – їх суперпозицію.

Механізм виникнення такого двокомпонентного спектру стає зрозумілим з огляду на кристалічну структуру YBCO (рис. 1), що схематично показано також на рис. 4с. Фотоемісійний сигнал є суперпозицією сигналу з першого підповерхневого подвійного шару CuO_2 та більш слабого сигналу з об'єму зразка. Рівень допування найближчого до поверхні подвійного шару CuO_2 змінено внаслідок руйнування ланцюжків CuO на поверхні. Ці ланцюжки слугують зарядовим резервуаром у цих сполуках. Ланцюжки, що залишилися на поверхні, збільшують концентрацію дірок у підповерхневому шарі CuO_2 , а зруйновані — зменшують. При цьому ділянки зі зменшеною концентрацією набувають властивостей Мотт-ізолятора й не роблять внеску у квазічастинковий спектр на поверхні Фермі. Отже, найінтенсивнішим є сигнал з передопованого ($x = 0,31$) і відповідно ненадпровідного підповерхневого бішару CuO_2 , а інша складова спектру походить від об'єму зразка з номінальним рівнем допування.

Підтвердженням цього є температурна залежність вищезгаданої "незвичайної" структури, які показано на рис. 5 і повністю відповідає температурній еволюції відповідного спектру в BSCCO [10]. Змінюючи хімічний склад кристалу, наприклад, шляхом допування Са, вдається досягти повного пригнічення поверхневого сигналу (див. рис. 6).



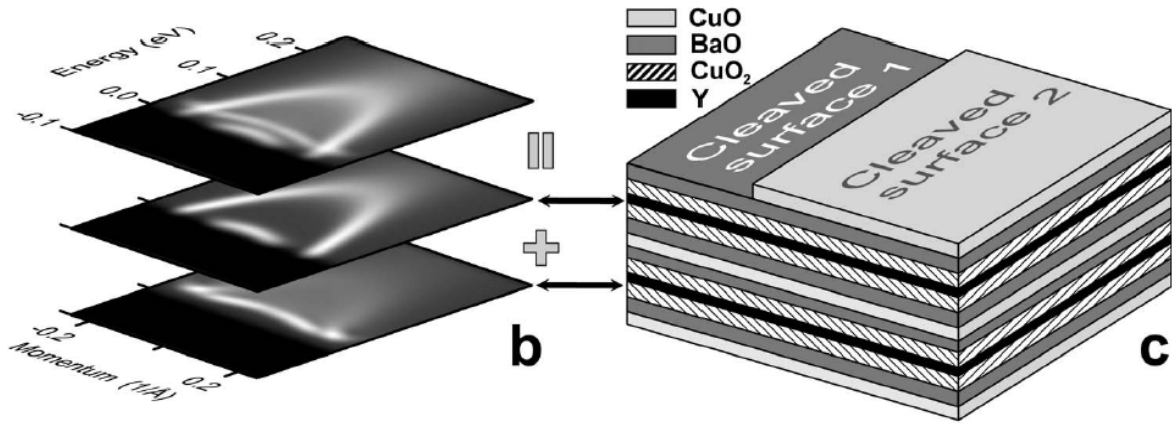
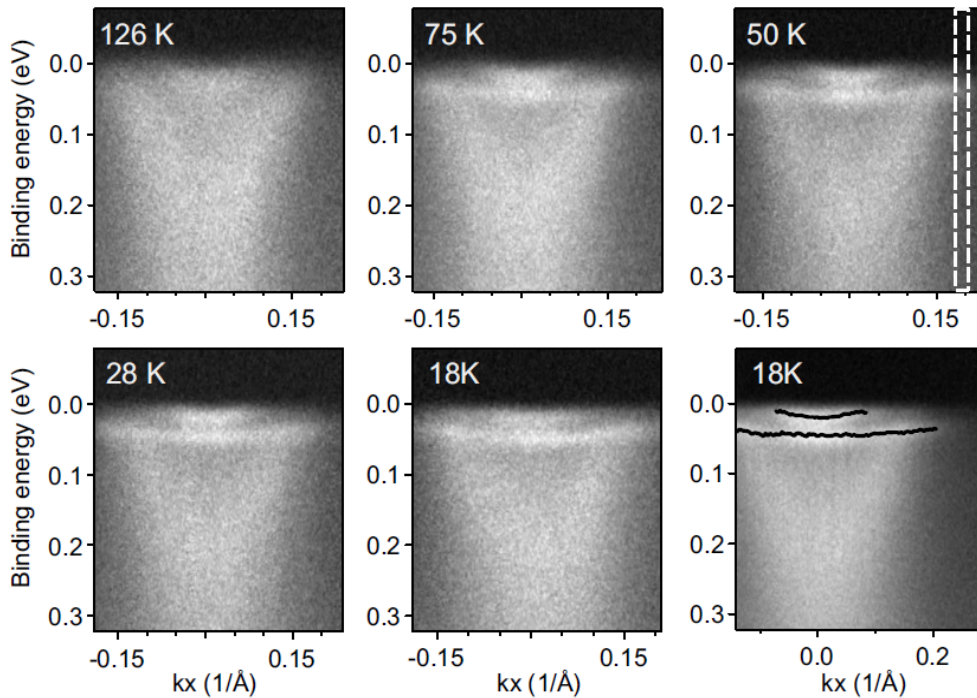


Рис. 4. Співіснування металевої та надпровідної компонент фотоемісійного спектру. (а) – експериментальний спектр, що поєднує внески від металевої та надпровідної компонент для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$, $k_y = 0,63 \pi/b$, $T = 30 \text{ K}$, $h\nu = 55 \text{ eV}$. (b) – схематичне зображення, що пояснює експериментальний спектр як суперпозицію сигналів від надпровідної (об’ємної) та металевої (поверхневої) складових. Найнижча картинка репрезентує надпровідний спектр, середня – металевої, верхня – їхню суперпозицію. (c) – схематична ілюстрація поверхні монокристала YBCO. Рівень допування найближчого до поверхні подвійного шару CuO_2 змінено внаслідок руйнування ланцюжків CuO на поверхні, що слугують зарядовим резервуаром в цих сполуках



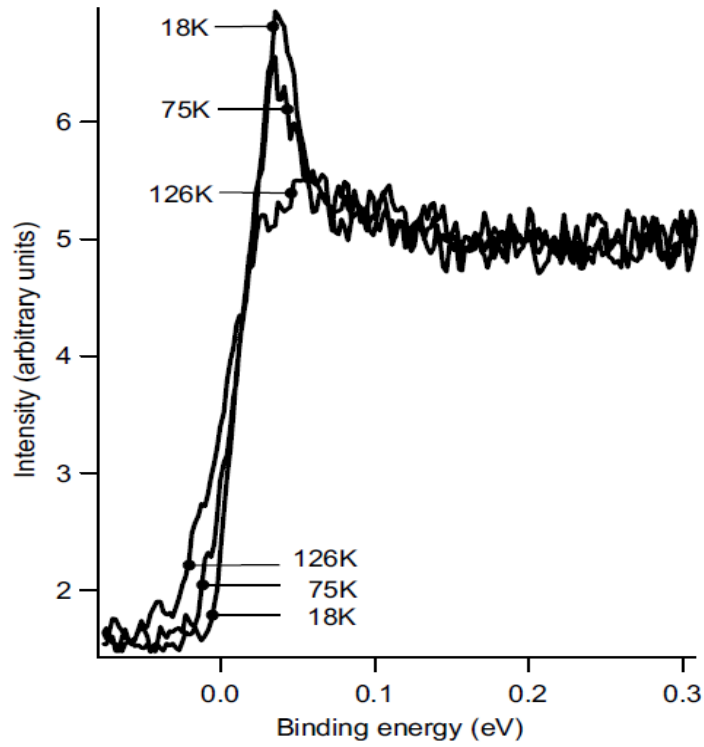
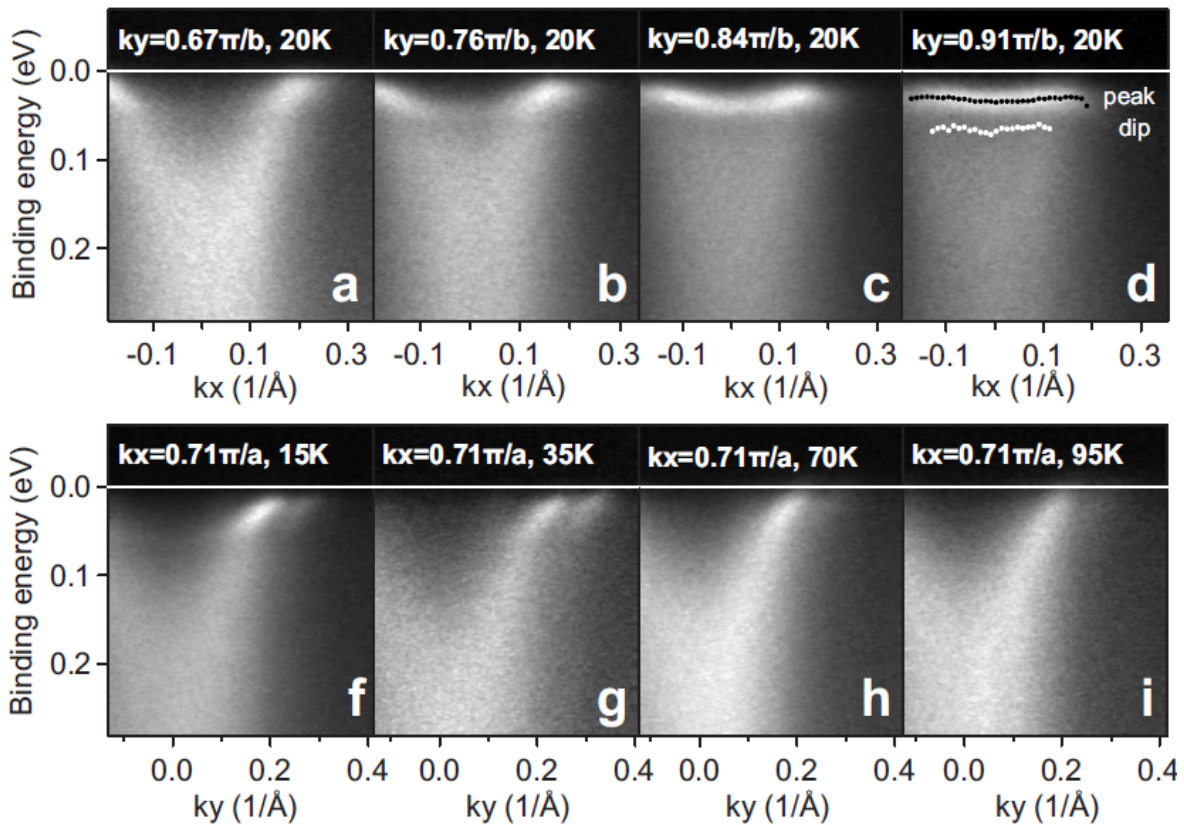


Рис. 5. Температурна залежність надпровідної складової спектру для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$. Нижня панель містить криві енергетичного розподілу інтенсивності (EDC), проінтегрованої у вузькому імпульсному діапазоні, показаному на панелі "50 K"



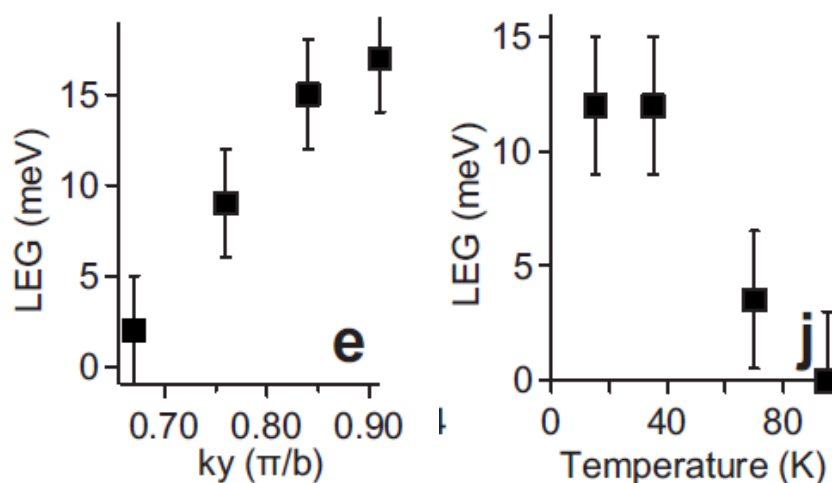


Рис. 6. Надпровідна компонента у $Y_{1-x}Ca_xBaCu_3O_{7-d}$, з $x = 0.15$ та з $T_c = 77$ К. (а)-(d): відкриття надпровідної щілини й збільшення величини ренормалізації при наближенні до антинодальної області. (f)-(i): еволюція спектру та надпровідної щілини зі збільшенням температури

Висновки

1. Фотоемісійні спектри $YBa_2Cu_3O_{7-d}$ мають, як правило, дві складові: металічну та надпровідну, які репрезентують сигнали з першого поверхневого подвійного CuO_2 шару та з об'єму зразка відповідно.
2. Поверхневий CuO_2 бішар є сильнопередопованим з концентрацією носіїв близько 0,3 дірки на елементарну комірку, яка майже не залежить від стехіометрії об'єму зразка.
3. В об'ємі $YBCO$ -зразків у надпровідному стані квазічастинковий спектр ренормалізовано відкриттям надпровідної щілини з d-хвильовою симетрією.
4. Подібно до $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+d}$ електронна структура в об'ємі $YBCO$ виявляє сильно анізотропну ренормалізацію, яка є максимальною в антинодальних областях та зникає вище T_c , що підтверджує універсальність висновку щодо магнітного походження анізотропної ренормалізації у ВТНП.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Zabolotnyy V. B. Momentum and temperature dependence of renormalization effects in the high-temperature superconductor $YBa_2Cu_3O_{7-d}$ / V. B. Zabolotnyy, S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk et al. // Phys. Rev. – 2007. – В 76. – P. 064519 (1 – 5).
2. Kordyuk A. A. Constituents of the quasiparticle spectrum along the nodal direction of high- T_c cuprates / A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, V. B. Zabolotnyy et al. // Phys. Rev. – 2006. – Lett. 97. – P. 017002 (1 – 4).
3. Gofron K. Occurrence of van Hove singularities in $YBa_2Cu_4O_8$ and $YBa_2Cu_3O_{6.9}$ / K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding et al. // J. Phys. – 1993. – Chem. Solids. 54. – P. 1193 – 1198.
4. Schabel M. C. Angle-resolved photoemission on untwinned $YBa_2Cu_3O_{6.95}$. I. Electronic structure and dispersion relations of surface and bulk bands / M. C. Schabel, C.-H. Park, A. Matsuura, Z.-X. Shen, D. A. Bonn // Phys. Rev. – 1998. – В 57. – P. 6090 (1 – 4).
5. Schabel M. C. Angle-resolved photoemission on untwinned $YBa_2Cu_3O_{6.95}$. II. Determination of Fermi surfaces / M. C. Schabel, C.-H. Park, A. Matsuura, Z.-X. Shen, D. A. Bonn, Ruixing Liang, and W. N. Hardy // Phys. Rev. – 1998. – В 57. – P. 6107 (1 – 6).
6. Lu D. H. Superconducting Gap and Strong In-Plane Anisotropy in Untwinned $YBa_2Cu_3O_{7-d}$ / D. H. Lu, D. L. Feng, N. P. Armitage, K. M. Shen, A. Damascelli, C. Kim, F. Ronning, Z.-X. Shen, D. A. Bonn, R. Liang, W. N. Hardy, A. I. Rykov, and S. Tajima // Phys. Rev. – 2001. – Lett. 86. – P. 4370 (1 – 5).
7. Andersen O. K. LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t_p , $t(k)$, and J / O. K. Andersen, A. I. Lichtenstein, O. Jepsen, and F. Paulsen // J. Phys. – 1995. – Chem. Solids. 56. – P. 1573 – 1578.
8. Kordyuk A. A. Evidence for CuO conducting band splitting in the nodal direction of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+d}$ / A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, A. N. Yaresko et al. // Phys. Rev. – 2004. – В. 70. – P. 214525 (1 – 5).
9. Luttinger J. M. Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions / J. M. Luttinger // Phys. Rev. – 1960. – 119. – P. 1153 (1 – 4).

10. Borisenko S. V. Anomalous Enhancement of the Coupling to the Magnetic Resonance Mode in Underdoped Pb-Bi₂₂₁₂ / S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, T. K. Kim, A. Koitzsch, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, M. Eschrig, H. Berger, and R. Follath // Phys. Rev. – 2003. – Lett. 90. – P. 207001 (1 – 6).

Борисенко Володимир Данилович – к. т. н, доцент кафедри фізики та фотоніки, тел. дом.: 466054, e-mail: vdbor@svitonline.com.
Вінницький національний технічний університет.

Борисенко Вікторія Геннадіївна – магістрант, тел. дом.: 463656.
Київський національний економічний університет ім. В. Гетьмана.