

สภาพนำยิ่งยวดอุณหภูมิวิกฤตสูงของสาร  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-y}$



นายประพิศน์ เกิดมันจิต

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2531

ISBN 974 - 568 - 660 - 3

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

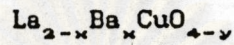
013803





HIGH -  $T_c$  SUPERCONDUCTIVITY

IN



Mr. Prapat Kertbundit

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements  
for the Degree of Master of Science.

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1988

ISBN 974 - 568 - 660 - 3

I 163329A5



Thesis Title High- $T_c$  Superconductivity in  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-y}$   
By Mr. Prapat Kertbundit  
Department Physics  
Thesis Advisors Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.  
Dr. Kajornyod Yoodee, Ph.D.



Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in  
Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree.

*Thavorn Vajrabhaya*  
-----  
Dean of Graduate School  
(Professor Thavorn Vajrabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

*Kitt Visoottivinth*  
-----  
Chairman  
(Associate Professor Kitt Visoottiviseth, Ph.D.)

*Virulh Sa-yakanit*  
-----  
Thesis Advisor  
(Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.)

*Kajornyod Yoodee*  
-----  
Thesis Advisor  
(Dr. Kajornyod Yoodee, Ph.D.)

*S. Yoksan*  
-----  
Member  
(Professor Suthat Yoksan, Ph.D.)

*Somphong Chatraphorn*  
-----  
Member  
(Assistant Professor Somphong Chatraphorn, M.Sc.)



ประพัฒน์ เกิดบัณฑิต : สภาพนำยิ่งยวดอุณหภูมิวิกฤตสูงของสาร  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-y}$   
(HIGH  $T_c$  SUPERCONDUCTIVITY IN  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-y}$ ) อ.ที่ปรึกษา : ศ.ดร.วิรุฬห์  
สายคณิต และ อ.ดร.ขจรยศ อยู่ดี, 44 หน้า.

จากงานของแล็บบีและบอคได้ทำการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานใน 2 มิติของระนาบ  $\text{CuO}_2$  ซึ่งอยู่ในโครงสร้างแบบเตตระโกนอลของ  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  พบว่าความหนาแน่นสถานะของระบบมีดีเอ็นเนอเรด ลอกการิทึมมิกซิงดูราลิตี การที่ลอกการิทึมมิกซิงดูราลิตีซ้อนทับกับระดับพลังงานเฟอร์มิทำให้เกิดการนำยิ่งยวด และเกิดผลกระทบแบบแจน - เทลเลอร์ ซึ่งทำให้เกิดการเพี้ยนไปเป็นโครงสร้างแบบออร์โธโรมบิก การแทนที่แลนทานัมอะตอมด้วยแบเรียมอะตอม และ/หรือ การเปลี่ยนความหนาแน่นของตำแหน่งที่ว่างของออกซิเจน จะไปลดความไม่เสถียร และทำให้โครงสร้างแบบเตตระโกนอล ซึ่งมีการนำยิ่งยวดเสถียร โดยใช้ทฤษฎีของบาร์ดีนคูเปอร์และซริฟเฟอร์ (บีซีเอส) ได้ทำการคำนวณอุณหภูมิวิกฤต พบว่าผลที่ได้ให้  $\sqrt{\lambda}$  แทนที่จะเป็น  $\lambda$  โดยที่  $\lambda$  คือค่าคงที่อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอน ซึ่งเป็นส่วนสำคัญที่ทำให้เกิดการขยายสูงขึ้นของอุณหภูมิวิกฤต



ศูนย์วิทยพัทยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ..... ฟิสิกส์  
สาขาวิชา ..... ฟิสิกส์  
ปีการศึกษา ..... 2530

ลายมือชื่อนิสิต .....  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....



PRAPAT KERTBUNDIT : HIGH T SUPERCONDUCTIVITY IN  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-y}$ .  
THESIS ADVISORS : PROF. VIRULH SA-YAKANIT AND DR. KAJORNYOD YOODEE  
44 PP.

Two dimensional energy band structure of a  $\text{CuO}_2$  plane in the , tetragonal phase of  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  has been calculated from the work of Labbe and Bok. In the corresponding density of states, a degenerate logarithmic singularity has been found. Coincidence of the logarithmic singularity and the Fermi energy causes the superconducting and the Jahn-Teller effect which results in orthorhombic distortion. The substitution of small amount of Ba to La, and/or changing of density of oxygen vacancies, is to suppress the instability and thus stabilize the tetragonal phase which is superconducting. Using the Bardeen, Cooper, and Schrieffer (BCS) theory, the critical temperature,  $T_c$ , has been calculated. It yields an expression for  $T_c$  in which  $\lambda$  is replaced by  $\sqrt{\lambda}$ , where  $\lambda$  is the electron-phonon interaction, and thus is a significant relative enhancement of  $T_c$ .



ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ..... ฟิสิกส์  
สาขาวิชา ..... ฟิสิกส์  
ปีการศึกษา ..... 2530

ลายมือชื่อนิสิต ..... ปรพวิมล เกดบัณฑิต  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ..... วิจารณ์ สาขานิต





## ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his sincere appreciation to Professor Dr. Virulh Sa-yakanit and Dr. Kajornyod Yoodee for their helpful and valuable suggestions, the encouragement and the patience they have shown throughout this research.

Thanks are also extended to Associate Professor Dr. Kitt Visoottiviseth, Professor Dr. Suthat Yoksan and Assistant Professor Somphong Chatraphorn for acting as members of the thesis committee.

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



CONTENTS



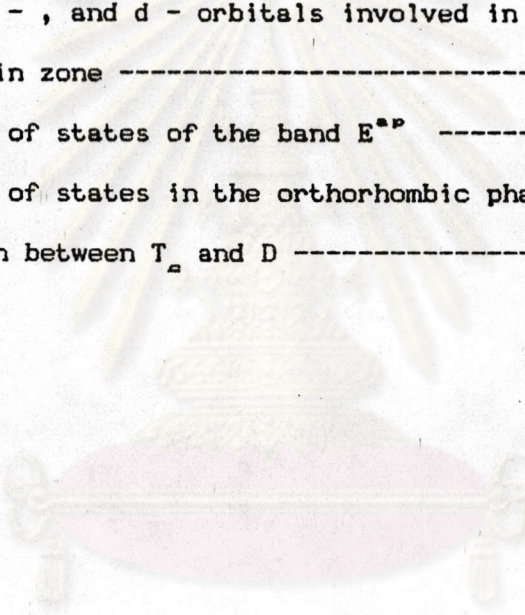
pages

ABSTRACTS .....	iv
ACKNOWLEDGEMENTS .....	vi
LIST OF ILLUSTRATIONS .....	viii
CHAPTER 1 INTRODUCTION .....	1
CHAPTER 2 TIGHT BINDING METHOD AND THE CALCULATION OF ENERGY BANDS .....	4
CHAPTER 3 DENSITY OF STATES .....	17
CHAPTER 4 CALCULATION OF THE CRITICAL TEMPERATURE, $T_c$ .....	28
CHAPTER 5 DISCUSSION AND CONCLUSION .....	34
APPENDIX A .....	39
REFERENCES .....	40
VITA.....	44

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

## LIST OF ILLUSTRATIONS

Figure		Page
1	The layered perovskite $K_2NiF_4$ structure -----	2
2	Crystal field splitting of d- and p-orbitals -----	7
3	Two dimensional crystal structure of Cu-O unit cell -----	8
4	s - , p - , and d - orbitals involved in the calculation -	8
5	Brillouin zone -----	19
6	Density of states of the band $E^{*p}$ -----	23
7	Density of states in the orthorhombic phase -----	25
8	Relation between $T_a$ and D -----	31


  
 ศูนย์วิทยทรัพยากร  
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย