

## О ВЛИЯНИИ БИСТАБИЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ АПЕКСНОГО АТОМА КИСЛОРОДА НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ПЕРЕХОД В $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

А.П.Сайко, В.Е.Гусаков, В.С.Кузьмин

*Институт физики твердого тела и полупроводников АН Белорусии  
220126, Минск, Белорусь*

Поступила в редакцию 20 августа 1992 г.

После переработки 23 сентября 1992 г.

Показано, что бистабильное поведение апексного атома кислорода в соединении  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  может привести к высоким температурам сверхпроводящего перехода в рамках электрон-фононного механизма спаривания.

1. Недавно<sup>1,2</sup> было экспериментально установлено, что в ВТСП соединении  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  атомы кислорода  $O(4)$  могут находиться в двух неэквивалентных состояниях – двухъямном асимметричном потенциале – вдоль кристаллографической оси  $c$ . Очевидно, что с изменением температуры в результате конкуренции ангармонических вкладов в потенциальный рельеф метастабильные состояния атомов апексного кислорода могут стать стабильными и – наоборот, то есть будут реализовываться скачкообразные переходы из одного состояния в другое с присущим таким случаям гистерезисом (см. текст ниже). В настоящей работе в рамках электрон-фононного механизма спаривания изучено поведение температуры  $T_c$  сверхпроводящего перехода в соединении  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  с учетом доминирующего влияния такой – ангармонически нестабильной – решетки, состоящей из апексных атомов кислорода. Отметим, что аналогичная задача для случая гармонически нестабильных решеток была рассмотрена в<sup>3,4</sup> (см. также<sup>5</sup>).

2. Будем предполагать, что апексные атомы кислорода движутся в асимметричном двухъямном потенциале вида  $V(q) = \alpha q^2/2 - \beta q^3/3 + \gamma q^4/4$  (рис.1), создаваемом атомами остова, и взаимодействуют между собой посредством дальнедействующих гармонических сил с константой связи  $f$ . Здесь  $q$  описывает мгновенные смещения кислорода из положения равновесия вдоль оси  $c$ ;  $\alpha, \beta, \gamma > 0$ .

Известное выражение<sup>6</sup> для эффективной константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$  для рассматриваемой (доминирующей) решеточной моды можно представить в виде

$$\lambda = \eta \text{Re}[-\langle\langle \delta q | \delta q \rangle\rangle_{\omega=0}], \quad (1)$$

где  $\langle\langle \delta q | \delta q \rangle\rangle_{\omega}$  – фурье-образ двухвременной температурной функции Грина (ФГ)<sup>7</sup>,  $\delta q = q - \langle q \rangle$ ,  $\langle q \rangle$  – квантостатистическое значение координаты  $q$ ,  $\eta$  – параметр Хопфилда. Если взаимодействие между апексными атомами кислорода рассматривать в приближении среднего поля (что естественно для случая дальнедействующих сил), а ангармонические эффекты учесть в приближении самосогласованных фононов<sup>7</sup>, то для искомой ФГ будем иметь:

$$\langle\langle \delta q | \delta q \rangle\rangle_{\omega} = [m(\omega^2 - \Omega^2)]^{-1}, \quad (2)$$

$$\Omega^2 \equiv [\alpha + 2f - 2\beta \langle q \rangle + 3\gamma(\sigma + \langle q \rangle^2)]/m,$$

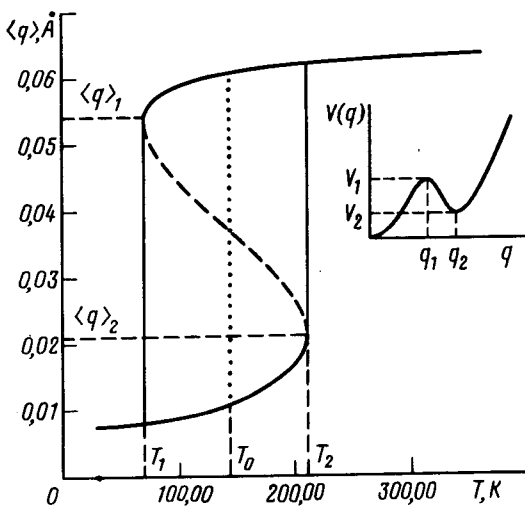
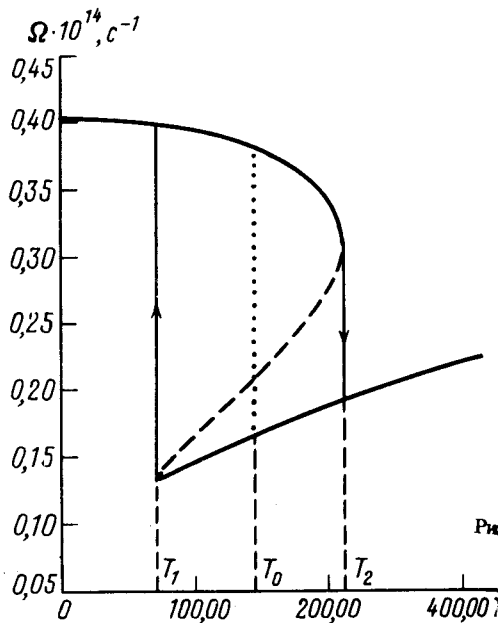


Рис.1

Рис.1. Бистабильное поведение среднестатистического смещения  $\langle q \rangle$  атома O(4) в зависимости от температуры; на вставке – модельный потенциал  $V(q)$ .  $V_1 = 0,04$  эВ;  $q_1 = 0,067$  Å;  $V_2 = 0,0045$  эВ;  $q_2 = 0,13$  Å

Рис.2. Температурная зависимость частоты колебаний  $\Omega$  атома O(4), перенормированной ангармоническими взаимодействиями



где  $\Omega$  – "одночастичная" частота, ренормированная ангармоническими взаимодействиями,  $\sigma = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$ ,  $m$  – масса атома кислорода. Используя соотношение, связывающее корреляционную функцию с ФГ:

$$\sigma = \int_0^{\infty} d\omega \text{cth}(\omega/2\theta) \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \delta q | \delta q \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} \right],$$

а также условие равенства нулю средней силы:  $(\partial/\partial t) \langle p(t) \rangle = 0$  (где  $p$  – импульс, сопряженный координате  $q$ ), получаем два уравнения для самосогласованного определения средних  $\langle q \rangle$  и  $\sigma$ :

$$\sigma = (1/2m\Omega) \text{cth}(\Omega/2\theta),$$

(3)

$$(\beta - 3\gamma \langle q \rangle) \sigma = \alpha \langle q \rangle - \beta \langle q \rangle^2 + \gamma \langle q \rangle^3.$$

Исследование бифуркционных свойств уравнений (3) показывает, что при определенных значениях параметров  $\alpha, \beta, \gamma, f$  существует гистерезисная петля (рис.1) около критической температуры  $T_0$  со скачком первого рода среднего смещения  $\langle q \rangle$  при температуре  $T_2$  (нагревание) и скачком  $\langle q \rangle$  при температуре  $T_1$  (охлаждение). Значения  $T_1$  и  $T_2$  определяют ширину этой петли; то есть система взаимодействующих ангармонических осцилляторов становится неустойчивой в точках  $(\langle q \rangle_1, T_1)$  и  $(\langle q \rangle_2, T_2)$ . В случае выполнения правила Максвелла скачок первого рода будет происходить при  $T_0$  без гистерезиса.

Аналогично ведет себя и  $\sigma$ ; бистабильное поведение характерно для эффективной частоты  $\Omega$  (рис.2), а также для других статистко-термодинамических параметров рассматриваемой системы. Действительно, в системе  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  гистерезисное поведение экспериментально наблюдалось для таких параметров, как модуль сдвига, теплопроводность, постоянные решетки с границами  $T_1 \sim 70$  и  $T_2 \sim 200 \text{ K}$ <sup>8-11</sup>.

3. Критическую температуру  $T_c$  сверхпроводящего перехода обсудим воспользовавшись стандартной формулой<sup>12</sup>:

$$k_B T_c = 0,26 \Omega [e^{2/\lambda} - 1]^{-1/2}, \quad \lambda = \eta/m\Omega^2. \quad (4)$$

Из формулы (4) очевидно, что особенности в поведении  $T_c$  определяются бистабильным поведением  $\Omega$ . Действительно, на рис.3 представлен график зависимости  $T_c$  от среднестатистического положения  $\langle q \rangle$  апексного атома кислорода.  $T_c$  растет в области бистабильности по мере увеличения  $\langle q \rangle$ , причем в точке  $\langle q \rangle_1$  - "переохлажденная" фоновая мода - достигается максимальное значение  $T_c^{\text{max}}$  ( $\Omega$  минимально).

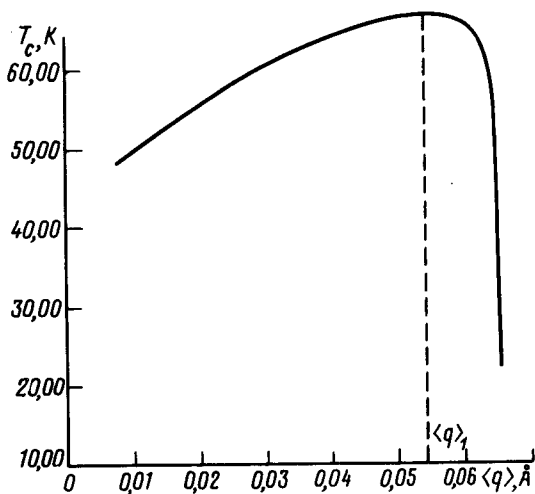


Рис.3. Критическая температура  $T_c$  сверхпроводящего перехода как функция среднестатистического положения атома O(4) в бистабильном потенциале

Для проведения численных оценок величины  $T_c$  параметры модели  $\alpha, \beta, \gamma, f$  и  $\eta$  оценивались следующим образом. На основании экспериментальных данных по комбинационному рассеянию света в системе  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ <sup>1</sup> затраточная частота апексного атома кислорода  $\sqrt{\alpha/m} \simeq 600 \text{ см}^{-1}$ . Коэффициенты  $\beta$  и  $\gamma$  полностью определяются величинами  $q_1$  и  $q_2$  (см. рис.1); экспериментальное значение параметра  $q_2$  лежит в интервале  $0,1-0,13 \text{ \AA}$ <sup>13</sup>;  $q_1 \simeq q_2/2$ ;  $f = \alpha \cdot 10^{-3}$  (слабо связанные осцилляторы); параметр Хопфилда  $\eta = 4$  (эВ/Å)<sup>4</sup>. Для данных параметров значения  $T_c$  лежат в области азотных температур ( $T_c^{\text{max}} > 70 \text{ K}$ ), что указывает на возможность объяснения высокой критической температуры сверхпроводящего перехода в рамках обычного электрон-фононного механизма спаривания электронов с участием бистабильной решеточной моды.

1. Л.В.Гаспаров, В.Д.Кулаковский, В.Б.Тимофеев, Е.Я.Шерман, ЖЭТФ **100**, 1681 (1991).
2. Yu.M.Baikov and S.L.Shokhor, Physica C **185-189**, 1589 (1991).
3. N.M.Plakida, V.L.Aksenov, and S.L.Drechsler, Europhys. Lett. **4**, 1309 (1987).
4. T.Galbaatar, S.L.Drechsler, N.M.Plakida, and G.M.Vujicic, Physica C **185-189**, 1529 (1991).
5. J.R.Hardy, T.W.Flocken, Phys. Rev. Lett. **60**, 2191 (1988).
6. J.C.K.Hui and P.V.Allen, J. Phys. F**4**, L42 (1974).
7. Н.М.Плакида, Статистическая физика и квантовая теория поля. Под ред. Н.Н.Боголюбова. М.: Наука, 1973.
8. A.Jezowski, J.Klamut, R.Horyn, and K.Rogacki, Supercond. Sci. Technol. **1**, 296 (1989).
9. M.F.Xu, A.Schenstrom, Y.Hong et al., IEEE Transactions on Magnetics. **25**, 2414 (1989).
10. С.А.Гриднев, О.Н.Иванов, О.В.Дыбова, СФХТ **3**, 65 (1990).
11. А.И.Головашкин, О.М.Иваненко, Г.И.Лейтус и др., Письма в ЖЭТФ **46**, 325 (1987).
12. V.Z.Krezin, Phys. Lett. A **122**, 434 (1987).
13. J.Ranninger, Z. Phys. B **84**, 167 (1991).