

О ГИСТЕРЕЗИСНОМ ПОВЕДЕНИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В СОЕДИНЕНИИ $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

А.П.Сайко, В.Е.Гусаков, В.С.Кузьмин

*Институт физики твердого тела и полупроводников АН Белорусии
220726, Минск, Белорусия*

Поступила в редакцию 16 декабря 1992 г.

Показано, что экспериментально наблюдаемый гистерезис теплопроводности как в сверхпроводящих, так и в несверхпроводящих соединениях $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ объясняется бистабильным поведением подрешетки из апексных атомов кислорода O(4).

1. Недавно¹ было показано, что существование бистабильной подрешетки в $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ системе, состоящей из апексных атомов кислорода, может привести к высоким температурам сверхпроводящего перехода в рамках обычного электрон-фононного механизма спаривания.

В настоящей статье мы хотим показать, что гистерезисное поведение апексных атомов кислорода позволяет дать теоретическое объяснение некоторым экспериментальным фактам, которые казались мало понятными до сих пор. Речь идет, в первую очередь, о прецизионных измерениях теплопроводности в системе $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ для $\delta = 0 \div 1$ ^{2,3}. Было установлено, что как в сверхпроводящем, так и в несверхпроводящем образцах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ существует гистерезис теплопроводности в очень большом температурном интервале: 80–240 К. Отсутствие подобного аномального поведения у электросопротивления, а также сравнительно небольшой вклад электронов в теплопроводность привели авторов работ^{2,3} к заключению, что гистерезис не связан с электронной составляющей и является результатом нестабильности фононной подсистемы.

2. Предполагая, что такие аномалии теплопроводности – следствие бистабильности подрешетки, образованной апексными атомами кислорода O(4), найдем соответствующий ей вклад в решеточную теплопроводность k ⁴:

$$k(T) = \frac{1}{3} c_v u \Lambda, \quad (1)$$

где u и Λ – соответственно средняя скорость и длина свободного пробега фононов, c_v – удельная теплоемкость при постоянном объеме. При этом, как и в¹, подрешетку атомов O(4) будем рассматривать как систему взаимодействующих ангармонических осцилляторов, каждый из которых движется в бистабильном потенциале. Если взаимодействие между осцилляторами имеет дальнедействующий дипольный характер, то силовые парные коэффициенты f_{ij} приближенно можно представить в виде $f_{ij} = f/N$ (где N – число элементарных ячеек, а индексы i, j пробегают все ячейки), и наша модель для одной коллективной степени свободы – колебаний атомов O(4) вдоль кристаллографической оси c – сведется к одночастичной проблеме – эффективному решеточному гамильтониану

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha + f}{2} q^2 - \frac{\beta}{3} q^3 + \frac{\gamma}{4} q^4 - f < q > q, \quad (2)$$

где q и p – канонически сопряженные координата и импульс ангармонического осциллятора в среднем поле $f < q >$ ($\langle \dots \rangle$ означает квантостатистическое усреднение относительно гамильтониана (2)). Сделав в (2) замену $q \rightarrow \langle q \rangle + \delta q$ и воспользовавшись приближением самосогласованных фононов⁵ ($\langle (\delta q)^{2n} \rangle = (2n-1) \dots 3\sigma^n$, $\langle (\delta q)^{2n+1} \rangle = 0$, n – целое), можно найти среднюю энергию $E = \langle H(p, \delta q) \rangle$:

$$E = \frac{\alpha + f}{2} \langle q \rangle^2 - \frac{\beta}{3} \langle q \rangle^3 + \frac{\gamma}{4} \langle q \rangle^4 - f \langle q \rangle^2 + \Omega^2 \sigma - \frac{3}{4} \gamma \sigma^2, \quad (3)$$

где $\langle q \rangle$ и $\sigma = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$ определяются самосогласованным образом из системы уравнений¹

$$\sigma = (\hbar/2m\Omega) \text{cth}(\hbar\Omega/2\theta), \quad (4)$$

$$(\beta - 3\gamma \langle q \rangle) \sigma = \alpha \langle q \rangle - \beta \langle q \rangle^2 + \gamma \langle q \rangle^3, \quad (5)$$

$$\Omega^2 \equiv [\alpha + f - 2\beta \langle q \rangle + 3\gamma(\sigma + \langle q \rangle^2)]/m, \quad \theta = k_B T. \quad (6)$$

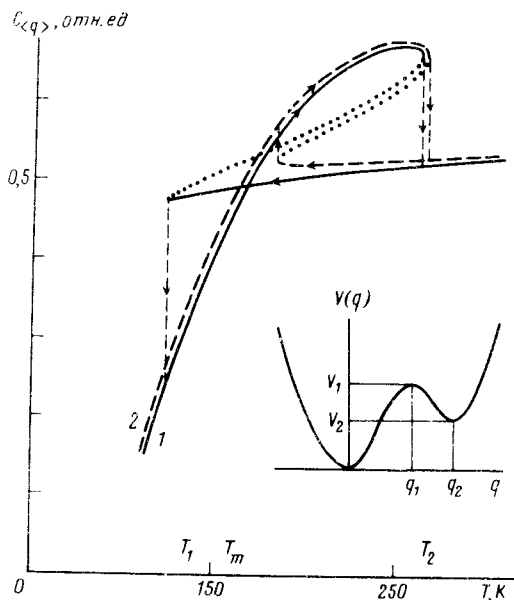


Рис.1. Температурная зависимость удельной теплоемкости $c_{\langle q \rangle}$, рассчитанная по формуле (7) (точками изображены нестабильные ветви). На вставке – одночастичный потенциал для аперксного атома кислорода O(4): $V(q) = \alpha q^2/2 - \beta q^3/3 + \gamma q^4/4$; параметры потенциала выбирались как и в

1 - $V_1 = 0,038$ эВ; $q_1 = 0,054$ Å; $V_2 = 0,0036$ эВ; $q_2 = 0,106$ Å;
 2 - $V_1 = 0,038$ эВ; $q_1 = 0,057$ Å; $V_2 = 0,0126$ эВ; $q_2 = 0,106$ Å. $f = 0,01\alpha$

Отсюда удельная теплоемкость при постоянном объеме (постоянном среднем смещении $\langle q \rangle$), приходящаяся на одну частицу, запишется в виде:

$$c_{\langle q \rangle} = k_B \left(\frac{\partial E}{\partial \theta} \right)_{\langle q \rangle} = k_B \frac{m\Omega^2(3\gamma\sigma + 2m\Omega^2)(4m^2\Omega^2\sigma^2 - \hbar^2)}{\theta[8\theta m^2\Omega^2 + 3\gamma(4m^2\Omega^2\sigma + 4\theta m\sigma - \hbar^2)]}. \quad (7)$$

Если теперь в (1) положить⁴: $u = \text{const}$, $\Lambda \sim T^{-1}$, то тогда вклад в теплопроводность, соответствующий ангармонически нестабильной решетке, может

быть оценен по формуле:

$$k_{inst} \sim c_{<q>} T^{-1}.$$

(8)

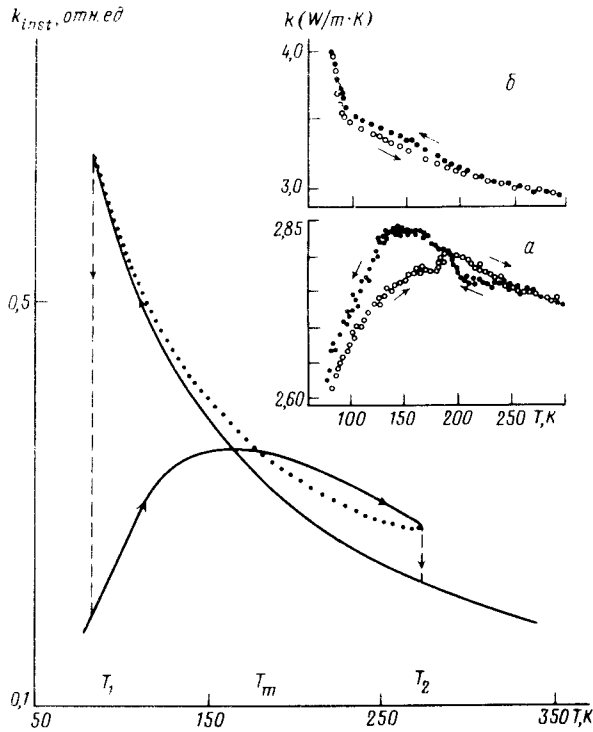


Рис.2. Теоретически рассчитанная температурная зависимость теплопроводности k_{inst} бистабильной подрешетки, состоящей из апексных атомов кислорода O(4) в соединении $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (точками изображена нестабильная ветвь). На вставках – экспериментально измеренные ^{2,3} температурные зависимости теплопроводности для $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$: а – несверхпроводящий образец ($\delta \approx 1$); б – сверхпроводящий образец ($\delta \approx 0$)

3. Теплоемкость, построенная по формуле (7) обладает гистерезисом (рис.1). Гистерезисная кривая трансформируется в зависимости от формы потенциала, в котором движется атом O(4): она имеет однопетлевый вид, когда один из минимумов метастабильный и – двухпетлевый, когда метастабильный минимум опускается так, что потенциал становится практически симметричным. При температурах T_1 , T_2 теплоемкость $c_{<q>}$ испытывает скачки конечной величины. Разрывное поведение теоретических кривых будет сглажено, если учесть затухание рассматриваемой решеточной моды.

Поведение теплопроводности k_{inst} изображено на рис.2; на вставках а и б – экспериментальные зависимости из работ ^{2,3}. Характер гистерезисного поведения – двухпетлевая форма, температурный интервал (T_1, T_m, T_2) и направление обхода гистерезисного контура – для несверхпроводящего образца $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ² (вставка а) качественно полностью передаются теоретической кривой. Положение точек T_1, T_m, T_2 , а также форма кривой сильно зависят от параметров потенциала.

Для сверхпроводящей системы экспериментально наблюдается однопетлевый характер гистерезиса (вставка б). Теоретически такой вид кривой можно

получить при варьировании параметров потенциала (на практике это может осуществляться, например, при изменении δ). Действительно, если один из минимумов потенциала метастабильный, то кривая теплопроводности принимает однопетлевый вид, однако, во-первых, она лежит в ином интервале: $T_m < T < T_2$, и, во-вторых, обход гистерезисного контура в этом случае оказывается противоположным наблюдаемому³ (см. приведенное выше обсуждение теплоемкости и вставки рис.2). С другой стороны, если принять во внимание, что для сверхпроводника разность значений теплопроводности для кривых нагревания и охлаждения уменьшается в 2-3 раза³, то можно прийти к заключению, что петля, лежащая в интервале $T_m < T < T_2$, по-видимому, просто не разрешается и на эксперименте наблюдается лишь петля в интервале $T_1 < T < T_m$. Характерный вид этой петли, а также более высокие значения теплопроводности объясняются вкладом электронной составляющей, резко возрастающим вблизи T_1 .

По-видимому, в сверхпроводящих и несверхпроводящих $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ системах реализуется ситуация, когда апексные атомы кислорода находятся в потенциале с двумя метастабильными минимумами (два почти эквивалентных состояния), то есть вариация δ в $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ влечет за собой лишь сравнительно слабое изменение формы потенциала и его положения (см.,⁶).

Таким образом, можно сказать, что гистерезис теплопроводности в сверхпроводящих и несверхпроводящих соединениях типа $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в области температур 80-240 К связан с гистерезисным поведением подрешетки, состоящей из апексных атомов кислорода O(4).

Работа профинансирована Фондом фундаментальных исследований Белоруссии.

-
1. А.П.Сайко, В.Е.Гусаков, В.С.Кузьмин, Письма в ЖЭТФ **56**, 425 (1992).
 2. A.Jezowski, J.Klamut, R.Horyn, and K.Rogacki, Supercond. Sci. Technol. **1**, 296 (1989).
 3. A.Jezowski, Sol. St. Comm. **71**, 419 (1989).
 4. Problems in Sol. St. Phys. Ed: H.J Goldsmid. N.Y.: Academic Press Inc. 1968.
 5. Н.М.Плакида, Статистическая физика и квантовая теория поля, под ред. Н.Н.Боголюбова. М.: Наука 1973.
 6. D.Mihailovic and C.M.Foster, Sol. St. Comm. **74**, 753 (1990).