

К объяснению зависимости T_c от давления в ВТСП купратах с различной степенью кислородной нестехиометрии

А. П. Сайко, В. Е. Гусаков

*Институт физики твердого тела и полупроводников АН Беларуси,
Беларусь, 220072, г. Минск, ул. П. Бровки, 17*

Статья поступила в редакцию 25 декабря 1995 г.

Теоретически объясняется поведение температуры сверхпроводящего перехода в ВТСП купратах с различной степенью кислородной нестехиометрии при наложении внешнего давления.

Теоретично пояснено поведінку температури надпровідного переходу в ВТНП купратах з різним ступенем кисневої нестехіометрії при накладенні зовнішнього тиску.

1. Критическая температура T_c сверхпроводящего перехода в ВТСП купратах (типичным примером которых является система $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$), содержащих апикальные атомы кислорода $\text{O}(4)$, повышается при наложении внешнего давления P (см., например, [1] и ссылки там). Примечательно, что если в «90-градусной» фазе ($0 < \delta < 0,2$) возрастание T_c невелико, то в обедненных кислородом ($0,2 < \delta < 0,5$) монокристаллических образцах с $T_c = 60$ К этот рост весьма значителен [1]; более того, при определенной величине давления система может стать двухфазной [2], т.е. в ней еще появляется сверхпроводящая 90-градусная фаза.

Обычно предполагают, что причиной насыщения зависимости T_c — формирования 90-градусной фазы — при $P > 5$ ГПа является насыщение числа дырок в плоскости CuO_2 [1] или же перераспределение кислорода в образце [2], хотя этот эффект до сих пор не нашел убедительного объяснения, подтвержденного количественными оценками.

Наложение давления вдоль кристаллографического направления c приводит к уменьшению расстояния между атомами меди $\text{Cu}(2)$ и кислорода $\text{O}(4)$ [3,4]; кроме того, наблюдается явная корреляция изменений T_c и расстояния $d_{\text{Cu}(2)-\text{O}(4)}$ [4]. При этом существенно, что потенциальная энергия апикального атома $\text{O}(4)$ имеет два минимума вдоль кристаллографической оси c [6–8].

Ввиду отмеченных предпосылок было бы уместным, используя теорию БКШ, связать изменение температуры сверхпроводящего перехода с особенностями динамики атомов $\text{O}(4)$, которые образуют бистабильную подрешетку [9–11], управляемую наложением внешнего давления и изменением кислородной нестехиометрии.

Ниже нами дается объяснение зависимости T_c от давления P для образцов с различными значениями индекса кислородной нестехиометрии δ на основе обобщенной модели бистабильной кислородной подрешетки, вносящей доминирующий вклад в БКШ-спаривание.

2. Для распространения развитой нами модели [9–11] на изучаемую ситуацию необходимо предусмотреть возможность учета в исходном гамильтониане членов, описывающих эффект наложения внешнего давления, а также зависимость от индекса δ . Чтобы сделать это наиболее адекватным образом, вначале рассмотрим и сопоставим ряд хорошо установленных экспериментальных фактов [3–8].

Во-первых, с изменением концентрации кислорода $\text{O}(1)$ температура перехода в сверхпроводящее состояние обнаруживает двухфазное поведение: T_c как функция δ приобретает вид ступеньки [5]. С другой стороны, практически такое же поведение наблюдается и для зависимости $\text{const } d_{\text{Cu}(2)-\text{O}(4)}$ от δ , т.е. с увеличением δ происходит нелинейное сокращение расстояния $d_{\text{Cu}(2)-\text{O}(4)}$ [5]. В-третьих (что особенно характерно), если построить кривую зависимости T_c от

изменяющегося под воздействием давления расстояния $d_{\text{Cu}(2)\text{-O}(4)}$, то она будет в основном повторять кривую, когда причиной изменения этого расстояния выступает изменение кислородной нестехиометрии δ [12].

Таким образом, как давление, так и увеличение концентрации кислорода ($\delta \rightarrow 0$) приводят к нелинейному сокращению расстояния $d_{\text{Cu}(2)\text{-O}(4)}$ и соответственно нелинейному росту T_c . Чтобы представить эту ситуацию математически, гамильтониан H бистабильной кислородной подрешетки [9–11] должен быть дополнен двумя слагаемыми, учитывающими искажение бистабильного потенциала из-за (а) приложенного давления и (б) изменения кислородной нестехиометрии, т.е. индекса δ . Наиболее простым способом это можно осуществить введением «внешнего поля», тогда

$$H = \sum_i \left\{ \frac{p_i^2}{2m} + V(q_i) - [K(1 - \varepsilon\delta) + F]q_i \right\} + \frac{1}{4} \sum_{ij} f_{ij}(q_i - q_j)^2, \quad (1)$$

где $V(q_i) = (\alpha/2)q_i^2 - (\beta/3)q_i^3 + (\gamma/4)q_i^4$ — асимметричный двухминимумный потенциал i -го атома O(4); q_i , p_i и m — соответственно его обобщенная координата вдоль оси \mathbf{c} , канонически сопряженный импульс и масса; α , β , γ — положительные константы; f_{ij} — коэффициенты гармонической связи; $F \sim |P|$ — дополнительная сила, возникающая между атомами Cu(2) и O(4) при наложении внешнего давления; параметр K описывает аналогичный эффект из-за вариации концентрации атомов O(1) ($\delta = 0-1$); числовое значение параметра ε подбирается из условия образования ступеньки на зависимости T_c от δ при сопоставлении теоретической и экспериментальных кривых. (Несколько с иных позиций зависимость $T_c(\delta)$ изучалась в работе [11]).

3. В приближении молекулярного поля эффективная частота Ω , среднестатистическое смещение кислородной подрешетки $\langle q \rangle$ и дисперсия $\sigma = \langle (q - \langle q \rangle)^2 \rangle$ будут определяться соотношениями

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

$$\sigma = (\hbar/2m\Omega) \text{cth}(\hbar\Omega/2k_B T), \quad (3)$$

$$(\beta - 3\gamma\langle q \rangle)\sigma = \alpha\langle q \rangle - \beta\langle q \rangle^2 + \gamma\langle q \rangle^3 - K(1 - \varepsilon\delta) - F, \quad (4)$$

где $f = Nf_{ij}$. Система уравнений (2)–(4) отличается от рассмотренной в [9] лишь присутствием в

правой части уравнения (4) членов, описывающих влияние «внешнего поля» ($K(1 - \varepsilon\delta) + F$).

Для обсуждения зависимости T_c от P (а также от δ) воспользуемся известной формулой Креси-на [13]

$$k_B T_c = 0,25 \Omega [\exp(2/\lambda) - 1]^{1/2}, \quad \lambda = \eta/m\Omega^2, \quad (5)$$

где λ — эффективная константа взаимодействия кислородной бистабильной подрешетки с электронной системой; η — параметр Хопфилда.

4. Параметры исходного потенциала $V(q_i) - K(1 - \varepsilon\delta)q_i$ в стехиометрическом образце ($\delta = 0$) для $F = 0$ выбираются с учетом экспериментальных данных [5–7]: $q_1 \approx 0,136 \text{ \AA}$; $q_2 \approx q_1/2 \approx 0,0692 \text{ \AA}$, $u_1 \approx 0,055 \text{ эВ}$; $K = 0,04 \text{ эВ/\AA}$ (рис. 1, вставка). При увеличении δ глобальный минимум, лежащий ближе к плоскости CuO₂, начинает подниматься и в конце концов колебания атомов O(4) локализуются около нового положения равновесия на более удаленном от плоскости CuO₂ расстоянии. Для такого выбора параметров по формулам (2)–(5) была рассчитана зависимость $T_c(\delta)$ (рис. 1; подробнее см. в [11]), которая качественно верно передает поведение соответствующей экспериментальной кривой [5].

Теперь мы можем, пользуясь формулами (2)–(5), непосредственно построить зависимости кри-

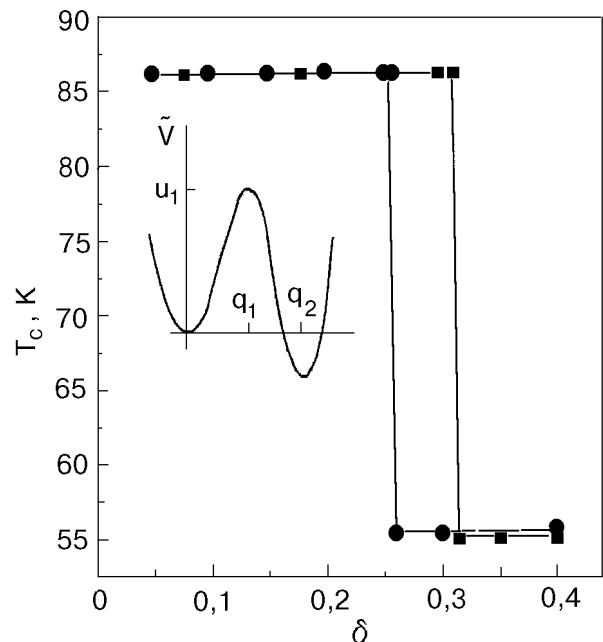


Рис. 1. Зависимость критической температуры T_c от индекса кислородной нестехиометрии δ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при $\varepsilon = 2$ и $P = 0$ (С) и 0,04 отн. ед. (S). Вставка: бистабильный потенциал $V(q_i) = V(q_i) - K(1 - \varepsilon\delta)q_i$ для $\delta = 0$.

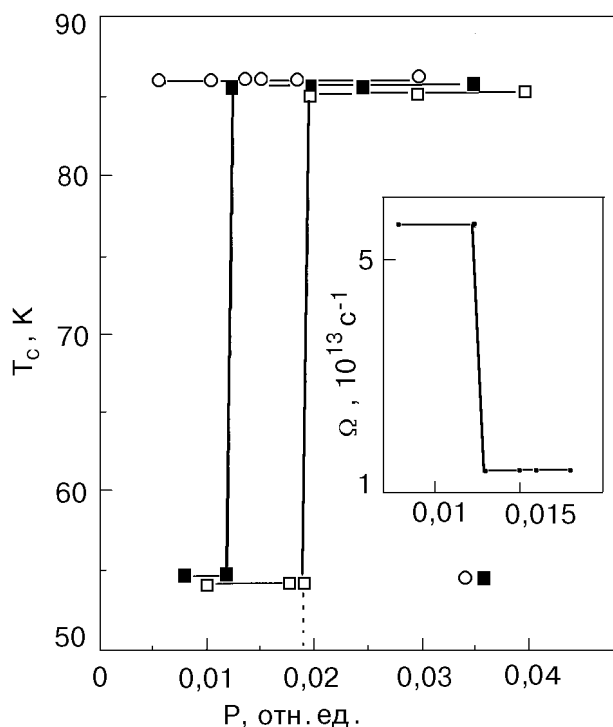


Рис. 2. Зависимость критической температуры T_c от величины внешнего давления. Расчет при трех значениях индекса δ : 0 (\circ); 0,4 (\square); 0,5 (\triangle) соответственно. Вставка: зависимость эффективной частоты колебаний бистабильной подрешетки апикальных атомов O(4) от внешнего давления.

тической температуры от давления (рис. 2), точнее $T_c(F)$ (F не совпадает прямо с P , и графики построены в относительных единицах по оси P), для различных значений индекса δ . Видно, что с уменьшением δ уменьшается и величина внешнего давления P_c , необходимого для перевода системы в 90-градусную фазу.

5. Приведенные зависимости имеют простое качественное объяснение. Как уже говорилось выше, рельеф потенциала подрешетки атомов O(4) трансформируется при изменении кислородной нестехиометрии, наложении внешнего давления (сжатия матрицы, формирующей бистабильный потенциал для атомов O(4)), а также при нагреве и охлаждении образца [14,15]. В результате один из минимумов (глобальный) становится метастабильным и наоборот, а эффективная частота Ω подрешеточных колебаний испытывает скачкообразное изменение (см. рис. 2, вставка, а также [9–11]). Доминирование такой бистабильной моды в БКШ-спаривании приводит соответственно к бистабильному поведению ряда физических характеристик сверхпроводника [9–11,14,15]. Поэтому рождение 90-градусной фазы при наложении давления на образец 60-градусной фазы или чередование

этих же фаз при вариации кислородной нестехиометрии физически означает «переключение» частоты моды Ω , доминирующей в БКШ-спаривании, за счет трансформации бистабильного потенциала апикальных атомов кислорода. Эти же причины [11] лежат в основе экспериментально наблюдаемого [16,17] эффекта несовпадения критической температуры T_c сверхпроводящего перехода при охлаждении образца с критической температурой разрушения сверхпроводящего состояния при отогреве.

В реальных образцах ступенчатая зависимость T_c от давления сглаживается из-за неоднородного распределения кислородных вакансий, т.е. вследствие того, что в одном и том же образце фактически существуют области с различными значениями δ . Поэтому если в областях, обедненных кислородом (относительно большие δ), 60-градусная фаза наблюдается вплоть до некоторого достаточно большого значения внешнего давления P_c (без существенного роста T_c), то для областей с меньшими значениями δ переход в 90-градусную фазу должен происходить уже при меньших давлениях (рис. 2). Таким образом, значительное возрастание T_c при наложении давления есть не что иное, как растянутый переход из 60-градусной фазы в 90-градусную фазу; в пределах же каждой из фаз рост T_c сравнительно небольшой, так как частота колебаний атомов O(4) около соответствующего положения равновесия с увеличением давления изменяется слабо. Следует также добавить, что при очень высоких давлениях возможно резкое падение T_c в 90-градусной фазе в связи с приближением к структурному переходу в тетрагональную фазу.

Работа поддержана Фондом фундаментальных исследований Беларуси.

1. E. N. Van Eenige, R. Griessen, R. J. Wijngaarden, J. Karpinski, E. Kaldis, S. Rusiecki, and E. Jilek, *Physica* **C168**, 482 (1990).
2. В. Г. Тиссен, М. В. Нефедова, *СФХТ* **3**, 109 (1990).
3. E. Kaldis, P. Fischer, A. W. Hewart, E. A. Hewart, J. Karpinski, and S. Rusiecki, *Physica* **C159**, 668 (1989).
4. R. I. Nelmes, J. S. Loveday, and E. Kaldis, *Physica* **C172**, 311 (1990).
5. R. J. Cava, A. W. Hewat, E. A. Hewat, B. Batlogg, M. Marezio, K. M. Rabe, J. J. Krajewski, W. F. Peck, and L. W. Rupp, *Physica* **C165**, 419 (1990).
6. J. Mustre de Leon, S. D. Conradson, I. Batistic, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1675 (1990).
7. Л. В. Гаспаров, В. Д. Кулаковский, В. Б. Тимофеев, Б. Я. Шерман, *ЖЭТФ* **100**, 1681 (1991).
8. D. Mihailovich, K. F. McCarty, and D. S. Ginley, *Phys. Rev.* **B47**, 8910 (1993).
9. А. П. Сайко, В. Е. Гусаков, В. С. Кузьмин, *Письма в ЖЭТФ* **56**, 425 (1992).
10. А. П. Сайко, В. Е. Гусаков, В. С. Кузьмин, *Письма в ЖЭТФ* **57**, 108 (1993).
11. А. П. Сайко, В. Е. Гусаков, *ЖЭТФ* **108**, 757 (1995).

12. В. А. Волошин, В. В. Бабенко, В. Г. Бутько, И. М. Резник, Я. И. Южелевский, *ФНТ* **20**, 603 (1994).
13. V. Z. Kresin, *Phys. Lett.* **A122**, 434 (1987).
14. A. P. Saiko, V. E. Gusakov, and V. S. Kuz'min, *Physica* **C235-240**, 1073 (1994).
15. A. P. Saiko, V. E. Gusakov, and V. S. Kuz'min, *Physica* **C235-240**, 1239 (1994).
16. A. A. Blinkin, V. N. Golovin, V. V. Derevyanko, G. F. Tikhinskii, and V. A. Finkel, *Phys. Status Solidi* **B151**, K161 (1989).
17. V. Foltin, S. Macica, and J. Foltin, *Phys. Status Solidi* **A140**, K99 (1993).

An explanation of the pressure dependence of T_c in HTS cuprates with different oxygen nonstoichiometry indexes

A. P. Saiko and V. E. Gusakov

The behavior of the superconducting transition temperature under external pressure is theoretically explained for HTS cuprates with different indexes of oxygen nonstoichiometry.