

## Корреляция свойств высокотемпературного сверхпроводника $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ с ангармоничностью атомных потенциалов

В. Г. Чудинов, А. Г. Чирков, Р. Р. Нургаянов

*Физико-технический институт Уральского отделения РАН,  
Россия, 426001, г. Ижевск, ул. Кирова, 132  
E-mail: chud@fti.udmurtia.su*

Статья поступила в редакцию 19 марта 1997 г., после переработки 26 августа 1997 г.

Методом молекулярной динамики на примере системы  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  показано, что при наличии большого вклада ангармонизма нарушаются условия каноничности. Вследствие этого могут возникать уже при низких температурах «горячие» области  $\sim 0,5$  нм вблизи примесных атомов Sr со средней кинетической энергией в 100–1000 раз большей, чем в матрице. Последняя «эффективно» охлаждается, и по ней, в принципе, за счет перколяций может протекать сверхпроводящий ток при любом механизме спаривания электронов. Распределение по скоростям описывается не одной, а по крайней мере двумя максвелловскими функциями. В ГЦК решетке никеля вблизи точки фазового перехода также появляются «горячие» точки, но не локализованные в пространстве, а блуждающие (время жизни  $\sim 10^{-12}$  с) и с существенно меньшей разницей кинетических энергий (в 1,5–2,0 раза). При низких температурах наблюдается прекрасное выполнение условий каноничности.

Методом молекулярної динаміки на прикладі системи  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  показано, що при наявності великого внеску ангармонізму порушуються канонічні умови. Внаслідок цього можуть виникати вже при низьких температурах «гарячі» області  $\sim 0,5$  нм поблизу домішкових атомів Sr з середньою кінетичною енергією в 100–1000 разів більшою, ніж в матриці. Остання «ефективно» охолоджується і по ній, в принципі, завдяки перколяціям може текти надпровідний струм при будь-якому механізмі спарювання електронів. Розподіл по швидкостям описується не однією, а принаймні двома максвелівськими функціями. В ГЦК гратці нікелю поблизу точки фазового переходу також з'являються «гарячі» точки, але не локалізовані в просторі, а блукаючі (час життя  $\sim 10^{-12}$  с) і з суттєво меншою різницею кінетичних енергій (у 1,5–2 рази). При низьких температурах спостережується чудове виконання умов канонічності.

PACS: 74.80.-g, 63.20. Pw

1. В 1988 г. Сиверсом и Такено [1] было показано, что в однородных решетках при значительном вкладе ангармонизма (в зависимости от его знака) могут возбуждаться локализованные низкочастотные либо высокочастотные колебания. В работах Бурлакова, Киселева и Рупасова [2] найдена их генеалогическая связь с солитонами огибающей и полной термализации нет. В рамках локального ангармонизма Саламатов и Чудинов [3] установили, что вблизи дефектов могут возникать либо локальные «холодные», либо локальные «горячие» области. Считалось, что

ангармонические осцилляторы (система) находились в равновесии с фононным полем (резервуаром). Гипотеза о микроскопически «горячих» точках была также высказана и при попытках трактовки явления «холодной» термоядерной реакции [4]. Локализация кинетической энергии была обнаружена методом молекулярной динамики Чудиновым, Чирковым и др. [5] в сильно ангармонической, анизотропной системе  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  вблизи примесных атомов Sr. Однако влияние этого явления на физическую природу высокотемпературной сверхпроводимости

остается до конца не ясным. Для этого случая может оказаться неприменимым обычно используемое квазигармоническое приближение [3] с малым вкладом ангармонизма.

2. В настоящей работе исследовано влияние степени неканоничности системы на ее динамические свойства. В качестве меры неканоничности принято отклонение от идеального максвелловского распределения по скоростям при заданной средней кинетической энергии атомов.

Особое внимание уделялось достижению системой состояния равновесия, которое устанавливалось за 10–20 периодов колебаний с временем релаксации  $\tau_p$ . В пределах точности нашего машинного эксперимента оно достигается за времена  $\sim 5 \cdot 10^{-11}$  с, т.е.  $\sim 10 \tau_p$ . За  $\tau_p$  принимается время, после которого состояние системы не зависит от начальных условий. Влияние размеров кристаллита также было проверено и в пределах ошибки эксперимента исключено.

Из основополагающих принципов следует, что основные законы термодинамики могут соблюдаться только в канонических системах [6,7]. Обычно в качестве неканонических рассматриваются незамкнутые системы [8,9]. Однако доказано, что условиям каноничности строго удовлетворяет весьма ограниченное число систем, например идеальный газ с взаимодействием атомов по закону абсолютно жестких сфер [7] или с потенциальной энергией отталкивания  $\sim A/r^n$  ( $n > 4$ ) [10]. В конденсированных средах задача сводится к рассмотрению газа квазичастиц — фононов, но только в гармоническом приближении газ фононов можно считать идеальным. При учете ангармонизма в общем случае система не является канонической и становится возможным появление солитоноподобных возбуждений. Для них известны решения только для частных случаев, которые приводят к нетрадиционным для статической термодинамики результатам — локальным распределениям по энергиям и концентрациям, теплопереносу и т.д.

Моделирование осуществлялось методом молекулярной динамики по программе, специально ориентированной на ВТСП, с потенциалами межатомного взаимодействия, рассчитанными для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  в работе [11]. Кристаллит состоял из  $\sim 2\,000$  атомов (два неподвижных слоя  $\text{La}(\text{Sr})\text{-O}$  и один слой подвижных атомов  $\text{CuO}_2$ ). По направлениям  $a$  и  $b$  использовались циклические граничные условия.

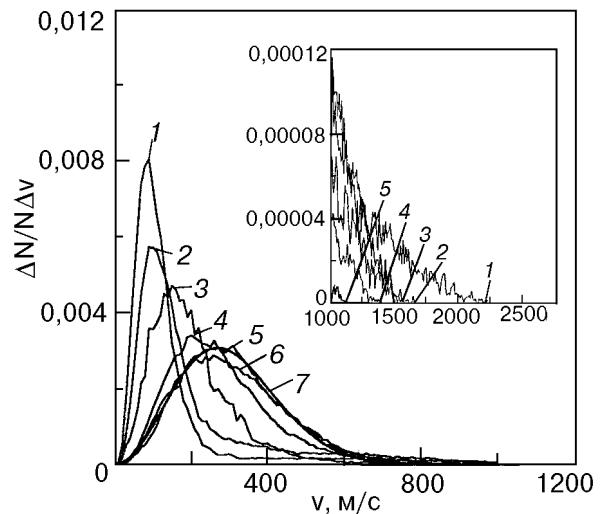


Рис. 1. Распределение по скоростям в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при средней кинетической энергии 70 К при различных концентрациях Sr,  $x$ : 0,17 (1); 0,25 (2); 0,12 (3); 0,08 (4); 0,03 (5); 0 (6); максвелловское распределение при  $T = 70$  К (7).

Были достигнуты времена  $\sim 10^{-10}$  с, для чего потребовалось  $\sim 10^6$  итераций. В начальный момент времени всем атомам задавались одинаковые, но случайно направленные скорости, после чего система приводилась в состояние равновесия.

3. В качестве примера на рис. 1 представлены равновесные распределения по скоростям для атомов кислорода в системе  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при различных  $x$  (соединения с  $x = 0$  и  $x > 0,17$  являются модельными). Наибольшие отклонения от максвелловского распределения наблюдаются при  $x = 0,17$ . Отметим, что зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации Sr имеет параболический характер с максимумом при  $x = 0,17$ , а система является сверхпроводящей в диапазоне концентраций  $x = 0,05\text{--}0,25$ .

Экспериментальная кривая подгонялась четырьмя функциями максвелловского распределения с  $T_1 = 9$  К,  $T_2 = 11$  К,  $T_3 = 400$  К,  $T_4 = 900$  К с весовыми вкладами 0,75; 0,1; 0,1; 0,05 соответственно. Практически все высокоэнергетические распределения создаются атомами кислорода слоя  $\text{CuO}_2$ , локализованными вблизи примесных атомов Sr. Их средняя энергия примерно в 100 раз превышает среднюю энергию атомов в матрице. Значительно меньший эффект наблюдается в крайних модельных случаях при  $x = 0$  и  $x = 2$ , когда в среде имеется значительный вклад ангармонизма, но системы однородные. Распределение по скоростям в значительно

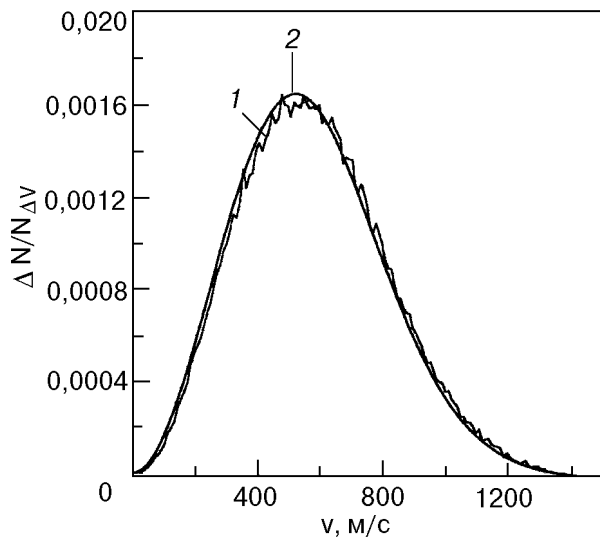


Рис. 2. Распределение по скоростям вблизи температуры плавления никеля при  $T = 930$  К: экспериментальное распределение (1); теоретическая кривая (2). Наилучшее описание при  $T_1 = 910$  К с весовым вкладом 0,97 и  $T_2 = 1610$  К с весовым вкладом 0,03.

меньшей мере отличается от максвелловского:  $T_1 = 50$  К,  $T_2 = 110$  К, весовые вклады 0,55 и 0,45 и  $T_1 = 40$  К,  $T_2 = 120$  К, весовые вклады 0,5 и 0,5. При других концентрациях ситуация промежуточная. Следует отметить, что при  $x = 0$  локальные колебания не наблюдались, а при  $x = 2$  они имеют характер блуждающих возбуждений солитонного типа. Пространственная локализация кинетической энергии имеет тот же характер, но только в каждый конкретный момент времени. В линейных системах такая ситуация хорошо известна как из теоретических работ, так и из компьютерных экспериментов [12].

Кроме того, были проведены контрольные расчеты для  $\gamma$ -Ni при  $T = 300$  К (твёрдое состояние, малый вклад ангармонизма) и в предплавленной области  $T \geq 1300$  К (сильный ангармонизм). В первом случае разница между теоретической и расчетной зависимостями распределений по скоростям в пределах погрешности не была обнаружена уже при временах  $\sim 10^{-12}$  с. Однако во втором случае тщательный анализ показывает, что требуются по крайней мере два распределения ( $T_1 = 910$  К,  $T_2 = 1610$  К с весовыми вкладами 0,97 и 0,03 соответственно) (рис. 2). Разница, конечно, существенно меньше, чем в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , но все же заметная. В теории жидкого и аморфного состояний мысль о неоднородности этих сред

высказывалась уже давно [13]. Например, «горячие» точки могут нести ответственность за них. Такая ситуация наблюдалась нами в аморфном сплаве  $\text{Ni}_{80}\text{Zr}_{20}$  [14].

Вполне вероятно, что нарушение канонических условий может привести к появлению «горячих» точек, в которых возможна термоядерная реакция (если температура тела  $\sim 10^3$  К, то у «горячих» точек она в среднем может быть  $\sim 10^5$  К и имеет довольно большую вероятность быть  $\sim 10^7$  К). Эта гипотеза подробно обсуждалась в работе [15]. Во всяком случае, имеются корреляции с системами с сильным ангармонизмом Pd-D и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -D.

4. Таким образом, на примерах  $\text{La}_{2-x}\text{SrCuO}_4$  и Ni показано, что в конденсированных средах при наличии сильного ангармонизма из-за нарушения канонических условий могут возникать статистические и динамические неоднородности, распределение по скоростям в которых можно описать набором максвелловских функций при различных температурах. Причем наблюдается корреляция между температурой перехода в сверхпроводящее состояние и величиной отклонения от степени каноничности.

1. A. Sievers and S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 970 (1988).
2. В. М. Бурлаков, С. А. Киселев, В. И. Рупасов, *Письма в ЖЭТФ* **51**, 481 (1990).
3. Е. И. Саламатов, В. Г. Чудинов, *ФТТ* **36**, 1392 (1994).
4. В. А. Царев, *УФН* **160**, 1 (1990).
5. В. Г. Чудинов, А. Г. Чирков, Е. Б. Долгушева, и др. *СФХТ* **6**, 205 (1993).
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
7. Ю. Л. Климонтович, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1982).
8. Г. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах: от диссипативных структур к упорядочению через флуктуации*, Мир, Москва (1979).
9. В. С. Иванова, А. С. Баланкин, И. Ж. Бунин и др. *Синергетика и фракталы в материаловедении*, Наука, Москва (1994).
10. *Неравновесные явления: уравнение Больцмана*, Л. Дж. Либовиц и Е. У. Монтролл (ред.), Мир, Москва (1986).
11. В. Г. Чудинов, Е. Б. Долгушева, А. А. Юрьев, *СФХТ* **4**, 2086 (1991).
12. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
13. В. В. Немешкаленко, А. В. Романова, А. Г. Ильинский и др., *Аморфные металлические сплавы*, Наукова думка, Киев (1987).
14. Р. Р. Нургаянов, В. Г. Чудинов, В. И. Ладьянов, *ФТТ* **39**, 961 (1997).
15. В. А. Царев, *УФН* **161**, 152 (1991).

---

Correlation of properties of high- $T_c$   
superconductor  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  and  
anharmonicity of atomic potentials

V. G. Chudinov, A. G. Chirkov,  
and R. R. Nourgayanov

By means of the molecular dynamics method it is shown that in the  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  system in the presence of a large contribution of anharmonicity the canonic conditions are broken. This can induce «hot» regions  $\sim 0.5$  nm even at low temperatures in

the vicinity of the impurity atoms Sr with the average kinetic energy 100–1000 times greater, than in a matrix. The matrix is «effectively» cooled and, due to percolations, the superconducting current can flow through it by any electron pairing mechanism. The velocity distribution is described not by one but, at least, by two Maxwellian functions. In the FCC lattice of Ni near the phase transition point «hot» points also appear. These are non-localized in space but wandering (lifetime  $\sim 10^{-12}$  s) and show essentially smaller difference in the kinetic the energies (1.5–2.0 time). At low temperatures the canonic conditions are fulfilled well.