

## К Р А Т К И Е С О О Б Щ Е Н И Я

© 1994

МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ  
В ПРЕДЕЛЕ СИЛЬНЫХ ПОЛЯРОН-ПОЛЯРОННЫХ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ*Е.С.Баланкина, Ю.Ф.Бычков*

Знание макроскопических параметров, характеризующих кристаллическое тело, таких как параметр Грюнайзена  $\gamma$ , параметр Андерсона-Грюнайзена  $\delta_s$ , температура Дебая  $\Theta_D$ , дает возможность описать многие свойства кристаллов, в том числе их зависимость от температуры и давления. В термодинамическом аспекте взаимосвязь между термоупругими свойствами кристаллов устанавливается с помощью вышеуказанных параметров. Однако их использование в этих целях встречается на практике значительные трудности, так как  $\gamma$ ,  $\delta_s$ ,  $\Theta_D$  в определенной степени сами являются функциями температуры и давления. Определение вида функции  $\gamma = \gamma(T)$ ,  $\delta_s = \delta_s(T)$ ,  $\Theta_D = \Theta_D(T)$  теоретическим путем принадлежит к числу сложнейших проблем теории твердого тела. Для описания этих свойств необходимо выбрать модель, которая позволит (хотя бы приближенно) определить зависимость  $\gamma$ ,  $\delta_s$ ,  $\Theta_D$  от температуры.

Открытие купратных ВТСП дало мощный импульс к созданию большого числа новых теорий. В настоящее время независимо развивается несколько подходов к построению моделей, основанных на различных механизмах сверхпроводимости, краткий обзор которых дан в [1]. В этой связи возникает принципиальный вопрос: какой тип теории — среднего поля или локальных пар — наиболее адекватно описывает новые ВТСП? Анализ экспериментальных данных по физическим свойствам, таким как характеристики упругости, параметры решетки, коэффициенты термического расширения и т.д., показал, что для Y-, Bi-, Tl-содержащих купратных ВТСП наблюдается аномалия на температурных зависимостях указанных физических свойств при температуре на 15–30 К выше температуры сверхпроводящего перехода [2–5]. Такая особенность в поведении физических свойств наводит на мысль, что наиболее адекватно новые ВТСП описывает теория локальных пар, так как наиболее существенным отличием этого механизма является то, что спаренные электроны существуют выше температуры сверхпроводящего перехода. В настоящей работе поведение  $\gamma = \gamma(T)$ ,  $\delta_s = \delta_s(T)$ ,  $\Theta_D = \Theta_D(T)$  определено в рамках биполярной теории сверхпроводимости с использованием двухуровневой модели. Применяемая модель рассмотрена в [6].

В [7] показано, что в случае слоистых материалов макроскопические модули упругости отличаются от средних значений модулей упругости незначительной поправкой, квадратичной по «анизотропной части» этих модулей. Так как влияние анизотропии на сдвиговые моды купратных ВТСП пренебрежимо мало [8,9], то квадратичной поправкой можно пренебречь и  $\Theta_D$  для этих ВТСП может быть вычислена следующим образом [10]:

$$\Theta_D = 1.122 (3/4\pi V_a)^{1/3} (G/\rho)^{1/2}, \quad (1)$$

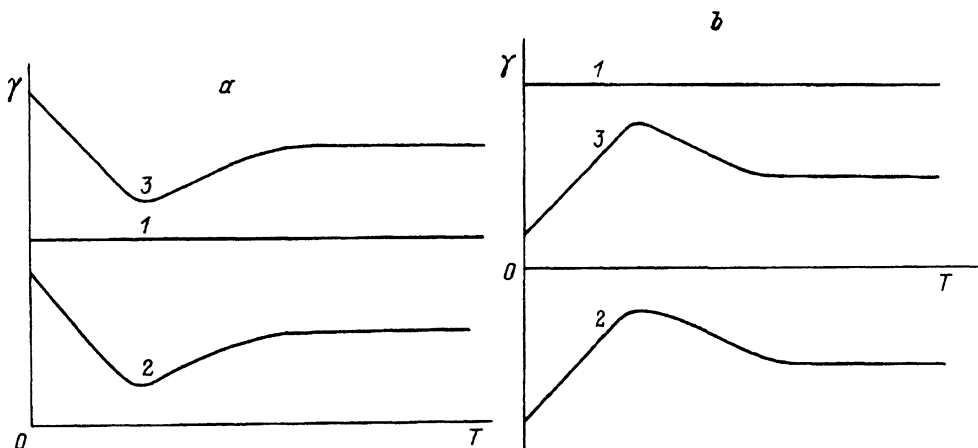
где  $\rho$  — плотность,  $G$  — модуль сдвига,  $V$  — атомный объем. Подставляя в (1) выражение для модуля  $G$  [6], находим поведение температуры Дебая вследствие частичного спаривания поляронов

$$\Theta_D = \Theta_{D_0} \left[ 1 + (n\Delta/8G_0) (1 + \text{th}(\Delta/2T)) (1/V) (\partial^2 V/\partial \epsilon_s^2) \right], \quad (2)$$

где  $n$  — концентрация поляронов,  $\Delta$  — энергия связи биполярона,  $\epsilon_s$  — сдвиговая деформация. Из (2) видно, что в зависимости от знака  $\partial^2 V/\partial \epsilon_s^2$  будет наблюдаться либо смягчение, либо ужесточение фононной моды.

Параметр Грюнайзена является важнейшим критерием проверки различных теорий кристаллов; исходя из конкретной модели, можно теоретическим путем вычислить  $\gamma$  и полученный результат сравнить с его экспериментальным значением (рассчитанным через экспериментальные данные по теплоемкости, объемного модуля упругости и коэффициента термического расширения [11]). По степени сходимости экспериментальных и теоретических величин  $\gamma$  можно заключить, насколько реальной является предложенная модель. Параметр  $\gamma$  характеризует ангармоничные свойства вещества. В низкотемпературном пределе он характеризует изменение  $\Theta_D$  с изменением объема [11]

$$\gamma = - \left( \partial \ln \Theta_D / \partial \ln V \right)_T. \quad (3)$$



Схематическая температурная зависимость поведения параметра Грюнайзена  $\gamma(T)$ .

$$\partial^2 V/\partial \epsilon_s^2 > 0 \quad (a), \quad \partial^2 V/\partial \epsilon_s^2 < 0 \quad (b).$$

1 — решеточный вклад, 2 — вклад вследствие распада биполяронов, 3 — полный параметр Грюнайзена.

Подставляя (2) в выражение (3), находим изменение параметра  $\gamma$  вследствие частичного спаривания поляронов

$$\gamma = \gamma_0 + (n\Delta/8G_0) \left[ 2(1 + \text{th}(\Delta/2T)) - (\Delta/2T) \text{ch}^{-2}(\Delta/2T) \right] (1/V) (\partial^2 V / \partial \varepsilon_s^2). \quad (4)$$

Из выражения (4) видно, что оно имеет либо минимум, либо максимум в зависимости от знака  $\partial^2 V / \partial \varepsilon_s^2$  при  $T = \Delta/3.25$  (см. рисунок, *a, b*) и дает возможность оценить значения  $\Delta$  и  $\partial^2 V / \partial \varepsilon_s^2$ . Такое поведение  $\gamma$  хорошо согласуется с экспериментально определенным поведением параметра Грюнайзена  $Y$ -содержащих купратных ВТСП (см. [12]; для  $\langle \gamma_n \rangle$   $\partial^2 V / \partial \varepsilon_s^2 < 0$ , для  $\gamma_c$   $\partial^2 V / \partial \varepsilon_s^2 = 0$ ) и, следовательно, подтверждает справедливость применяемой модели.

Параметр Андерсона-Грюнайзена имеет вид [11]

$$\delta_s = (1/\beta) (\partial \ln B_s / \partial T)_p. \quad (5)$$

Подставляя в (5) выражение для коэффициента термического расширения  $\beta$  [13] и объемного модуля упругости  $B_s$  [14], находим изменение  $\delta_s$  вследствие частичного спаривания поляронов

$$\delta_s = 1 + (\Delta/T) \text{th}(\Delta/2T), \quad (6)$$

т.е. с понижением температуры параметр Андерсона-Грюнайзена возрастает. Зная поведение параметра  $\delta_s$  и модуля  $B_s$ , можно оценить энергию сцепления кристалла [11].

### Список литературы

- [1] Давыдов А.С. Высокотемпературная сверхпроводимость. Киев: Наукова думка, 1990. 174 с.
- [2] Wang Y.-N., Chen X.-H., Shen H.-M., Sun L.-H. // *Physica C*. 1989. V. 162-164. P. 456-457.
- [3] Wang Y.-N., Wu J., Shen H.-M., Zhu J.-S., Chen X.-H., Yan Y.-F., Zhao Z.-X. // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. N 13. P. 8981-85.
- [4] Battacharya S., Higgins M.J., Johnston D.C., Jacobson A.J., Stokes J.P., Goshorn D.P., Lewandowski J.T. // *Supercond. Sci. Technol.* 1989. V. 2. P. 52-55.
- [5] Chen X., Shen H., Wang Y. // *Modern Phys. Lett. B*. 1989. V. 3. N 16. P. 1241-1246.
- [6] Баланкина Е.С. // *ФТТ*. 1992. Т. 34. № 9. С. 2937-2939.
- [7] Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. // *ЖЭТФ*. 1946. № 11. С. 967.
- [8] Ledbetter H., Lei M. // *J. Mater. Res.* 1990. V. 5. N 2. P. 241-244.
- [9] Беломестных В.Н., Хасанов О.Л., Буш А.А., Сиротинкин В.П. // *СФХТ*. 1990. Т. 3. № 2. С. 221-224.
- [10] Kim T.J., Kowalewski J., Assmus W., Grill W. // *Z. Phys. B: Cond. Matter* 1990. V. 78. P. 207-212.
- [11] Цагарейшвили Д.Ш. Методы расчета термических и упругих свойств кристаллических неорганических веществ. Тбилиси: Манциерба, 1977. 263 с.
- [12] Gavarrì J.R., Carrel C. // *Physica C*. 1990. V. 166. P. 323-328.
- [13] Александров А.С., Корнилович П.Э., Шевченко А.Д., Шульженко А.А. // *ФТТ*. 1990. Т. 32. № 1. С. 303-305.
- [14] Баланкина Е.С. // *Письма в ЖТФ*. 1991. Т. 17. № 21. С. 43-47.

Инженерно-физический институт  
Москва

Поступило в Редакцию  
25 июня 1993 г.  
В окончательной редакции  
23 декабря 1993 г.