

- [3] Vail J. M., Harker A. H., Harding J. H. // J. Phys. C.: Sol. St. Phys. 1984. V. 17. N 19. P. 3401—3414.
 [4] Миронова Н. А., Улманис У. А. Радиационные дефекты и ионы металлов группы железа в оксидах. Рига: Зинатне, 1988. 202 с.
 [5] Vosko S. H., Wilk I., Nusar M. // Can. J. Phys. 1980. V. 58. P. 1200—1211.

Уральский политехнический институт
 им. С. М. Кирова
 Свердловск

Поступило в Редакцию
 28 апреля 1989 г.
 В окончательной редакции
 18 июля 1989 г.

УДК 537.226

© Физика твердого тела, том 32, в. 1, 1990
 Solid State Physics, vol. 32, N 1, 1990

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

А. С. Александров, П. Э. Корнилович, А. Д. Шевченко, А. А. Шульженко

Измерен коэффициент теплового расширения $\alpha(T)$ керамических образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в температурном интервале 78—300 К. Исследуемые образцы были получены спеканием порошков соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в условиях высокого давления (4 ГПа и 1223 К). Термобарическая обработка образцов проводилась с использованием гидравлического пресса

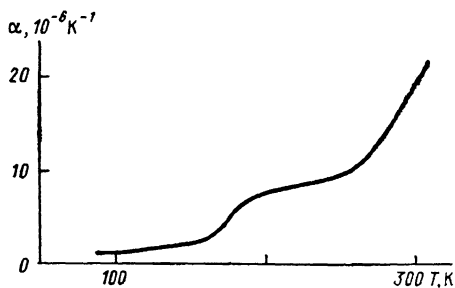


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения.

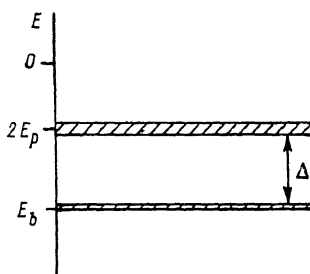


Рис. 2. Возможные значения суммарной энергии двух поляронов в биполяронном кристалле.

с усилием 600 тс и твердофазовых камер высокого давления. Потеря кислорода при термобарической обработке устранялась с помощью специальных технологических приемов, которые обеспечивали герметичность камеры высокого давления в течение всего периода обработки. Камера была заполнена газообразным кислородом под давлением 4 ГПа, в нее помещалась защитная среда с порошком $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Микроструктура и состав полученных образцов изучались на электронном сканирующем микроскопе с электронным микронзондом фирмы «Самscan». Рентгеноструктурный анализ образцов показал, что они имеют структуру типа 1—2—3.

Контроль температуры сверхпроводящего перехода T_c осуществлялся по измерению температурных зависимостей намагниченности. Величина $T_c = 92$ К. Диамагнитный отклик в образцах при $T < T_c$ составлял $\approx 100\%$.

Измерение коэффициента теплового расширения проводилось на установке фирмы «Du Pont». На рис. 1 приведены результаты измерений. Видно, что температурная зависимость $\alpha(T)$ характеризуется наличием инвариантного эффекта в интервале 78—130 К (α мало и практически не зависит от температуры) и особенностями при $T \approx 170$ К. Отметим, что подобные аномалии $\alpha(T)$ уже наблюдались в [1].

Для уяснения одного из возможных механизмов возникновения особенности $\alpha(T)$ рассмотрим тепловое расширение в рамках биполяронной теории сверхпроводимости [2-4]. В биполяронном кристалле два полярона могут находиться в разных ячейках (при этом у каждого будет энергия E_p) или в одной ячейке, образуя биполярон с энергией $E_b = 2E_p - \Delta$, где Δ — энергия связи биполярона. Таким образом, зонная структура представляет собой две узкие зоны — поляронную и биполяронную, разделенные щелью Δ (рис. 2). При $T \ll \Delta$ все поляроны спарены в биполяроны и заполняют нижнюю зону, при $T \gg \Delta$ происходит частичное распаривание биполяронов, при этом образующиеся поляроны заполняют верхнюю зону.

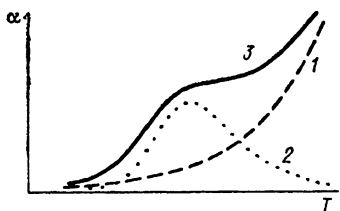


Рис. 3. Схематическая иллюстрация возникновения особенности зависимости $\alpha(T)$.

1 — решеточный вклад, 2 — вклад от распаривания биполяронов, 3 — полный коэффициент теплового расширения.

В дальнейшем будем пренебрегать шириной обеих зон по сравнению с Δ . Таким образом, в простейшем приближении мы имеем дело с двухуровневой моделью, свойства которой хорошо известны.

Свободная энергия системы ($k_B = 1$)

$$F = \frac{N}{2} \left[2E_p - \frac{\Delta}{2} - T \ln \left(2 \operatorname{ch} \frac{\Delta}{2T} \right) \right], \quad (1)$$

где N — полное число поляронов. Используя выражения для давления $P = -(\partial F / \partial T)_V$ и коэффициента теплового расширения $\alpha = 1/3B \cdot (\partial P / \partial T)_V$, где $B = -1/V (\partial P / \partial V)_T$ — модуль всестороннего сжатия, получим

$$\alpha = -\frac{1}{3B} \frac{N}{2} \frac{\Delta}{(2T)^2 \operatorname{ch}^2 \frac{\Delta}{2T}} \frac{\partial \Delta}{\partial V}. \quad (2)$$

При этом мы считаем, что Δ слабо зависит от температуры. С учетом того, что в пределе бесконечно узких зон [2] $\Delta = -2 \left(v_{\text{кул}} - \sum_{\mathbf{q}} U^2(\mathbf{q}) / \omega_{\mathbf{q}} \right) \sim \sim 1/V$, где $v_{\text{кул}}$ — кулоновское взаимодействие поляронов, $U(\mathbf{q})$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, $\omega_{\mathbf{q}}$ — фононная частота, окончательно получаем

$$\alpha = \frac{1}{3B} \frac{n}{2} \left(\frac{\Delta}{2T \operatorname{ch} \frac{\Delta}{2T}} \right)^2, \quad (3)$$

где $n = N/V$ — концентрация поляронов.

Тепловое расширение, обусловленное распариванием биполяронов и описываемое формулой (3), следует рассматривать как добавочное к тепловому расширению решетки, обусловленному ангармонизмом колебаний ионов. Так как зависимость (3) имеет максимум при $T \sim \Delta/2$, этот максимум может быть ответственным за экспериментально наблюдаемую особенность $\alpha(T)$ на фоне достаточно плавной температурной зависимости решеточного коэффициента теплового расширения, что схематически показано на рис. 3.

Авторы признательны В. Г. Барьяхтару за постоянный интерес к работе.

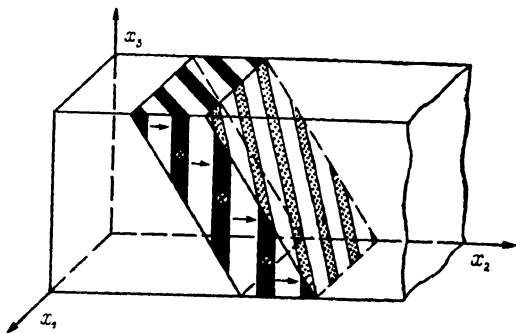
Список литературы

- [1] Басаргин О. В., Рудницкий Л. А., Мошалков В. В., Кауль А. Р., Грабой И. Э. Третьяков Ю. Д. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 3. С. 877—879.
 [2] Alexandrov A., Ranninger J. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. N 4. P. 1796—1801.

УСЛОВИЕ ДВОЙНИКОВАНИЯ СЕГНЕТОФАЗЫ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ В МНОГООСНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

В. Г. Гавриляченко, А. Ф. Семенчев, Е. Г. Фесенко

Фазовые переходы (ФП) в многоосных сегнетоэлектрических кристаллах имеют общие черты с мартенситными превращениями. Это обусловлено тем, что дальное действие сил электростатической природы снимается образованием в сегнетофазе (СФ) 180° -ных доменов и экранировавшем поляризации P_s свободными носителями зарядов^[1], поэтому форму равновесных зародышей новой фазы и кинетику ФП определяют процессы релаксации внутренних механических напряжений. Из теории гетерофазных структур^[2] следует, что наилучшему согласованному фаз отвечает пластинчатый зародыш СФ, оптимально ориентированный и сдвойникованный. Однако для того, чтобы зародыш был сдвойникован, он должен испытывать механические напряжения, достаточные для преодоления предела упругости. Найдем условие двойникования пластинчатого зародыша тетрагональной СФ в матрице кубической парафазы (ПФ), схематически представленного на рисунке.



Полидоменная сегнетоэлектрическая пластина в параэлектрической матрице. Направления P_s показаны стрелками.

Согласно [3, 4] на такой зародыш действуют электрострикционные механические напряжения, обусловленные влиянием матрицы

$$\sigma_n = c_{np} \xi_p \quad (n, p = 1 \dots 6), \quad (1)$$

где c_{np} — модули упругости ПФ, ξ_p — индуцированная деформация. Все компоненты тензора σ_n , кроме σ_4 и σ_6 , отличаются от нуля. Индуцированные деформации, испытываемые зародышем, связаны со скачком спонтанной поляризации при ФП ΔP_s следующим образом:

$$\xi_p = A_{pm} (\Delta P_s)_m^2 \quad (p, m = 1 \dots 6). \quad (2)$$

В (2) A_{pm} — перенормированные упругим взаимодействием электрострикционные коэффициенты. Они являются сложной функцией модулей упругости и коэффициентов электрострикции кристалла, а также зависят от концентрации двойников и ориентации пластины [3, 4].

Двойникование можно представить как потерю устойчивости СФ с одним направлением P_s (по x_2) по отношению к СФ с другим направлением P_s (по x_1) в поле механических напряжений. Запишем разложение термодина-