

01; 05.4

© 1993

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРЫ
И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ТЕМПЕРАТУРУ
СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА В $YBa_2Cu_3O_{7-x}$

Б.Л. Оксенгендлер, З.И. Каримов,
Ю.В. Пахаруков, В.Ю. Сотников,
А. Юсупов

Уже довольно быстро после открытия ВТСП материалов было установлено, что атомное состояние плоскости $СuO$ существенно сказывается на температуре сверхпроводящего перехода в кристалле $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ [1]. Среди таких экспериментов, с нашей точки зрения, исключительно важное значение имеют результаты [2] (получение зависимости $T_c(x)$, причем $(dT_c/dx) < 0$) и [3] (получение зависимости $T_c(\varphi)$ при $x = const$, где φ - параметр дальнего порядка, причем $(dT_c/d\varphi) > 0$).

Получим эти зависимости теоретически в рамках единых приближений.

Согласно результатам [4], будем полагать, что T_c описывается формулой квази-БКШ [4]:

$$T_c = 1.14 \langle \omega \rangle \exp[-1/N(E_F)V], \quad (1)$$

где $N(E_F)$ - плотность числа состояний на поверхности Ферми (вычисляется квантово-химически), $\langle \omega \rangle$ и V - пара полуэмпирических параметров, получающихся из сравнения теории с экспериментом.

Введем параметр дальнего порядка φ . Для нестехиометрического кристалла $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ тогда имеем

$$r_4 = \frac{1-x}{2}(1+\varphi), \quad r_5 = \frac{1-x}{2}(1-\varphi), \quad (2)$$

где r_4 и r_5 - вероятности заполнения позиций O4 и O5 в плоскости $СuO$.

Тогда для плотности числа состояний на поверхности Ферми, связанных с атомами кислорода, имеем

$$N(E_F, x, \varphi) = N_0(E_F) + \Delta N_4 \frac{1-x}{2}(1+\varphi) + \Delta N_5 \frac{1-x}{2}(1-\varphi). \quad (3)$$

Здесь $N_0(E_F)$ - плотность числа состояний, связанных со всеми атомами O, кроме находящихся в плоскости $СuO$, ΔN_4 и ΔN_5 -

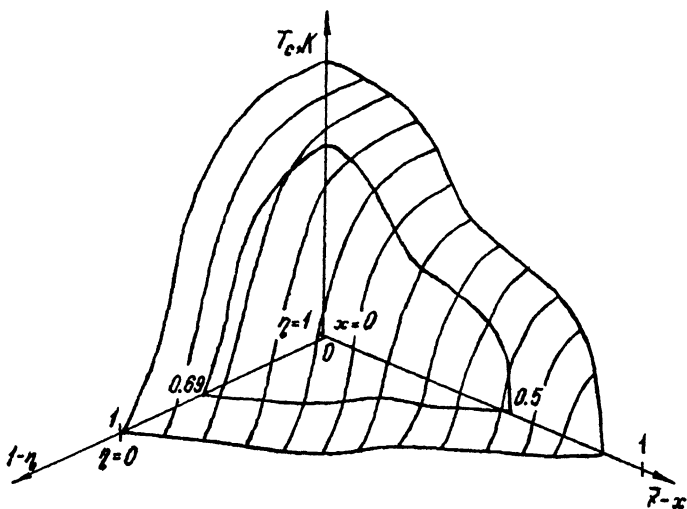


Рис. 1. График зависимости T_C от стехиометрии и степени упорядочения кристалла $YBa_2Cu_3O_{7-x}$.

плотности числа состояний, обусловленные заполнением одной позиции 04 и 05 соответственно. Отсюда

$$T_C = 1.14 \langle \omega \rangle \exp \left[-1/(A + B\eta) \right], \quad (4)$$

где

$$A = \left[N_0 + (\Delta N_4 + \Delta N_5) \frac{1-x}{2} \right] V, \quad (4a)$$

$$B = \left[(\Delta N_4 - \Delta N_5) \frac{1-x}{2} \right] V. \quad (4b)$$

Из (4) непременно следует, что

$$\left(\frac{\partial T_C}{\partial x} \right) \Big|_{\eta = \text{const}} < 0, \quad \left(\frac{\partial T_C}{\partial \eta} \right) \Big|_{x = \text{const}} > 0$$

в полном согласии с экспериментами [2, 3].

Далее, согласно [4], имеем $N_0(E_F) = 5.44 \frac{\text{сост.}}{\text{эВ яч.}}$; $\Delta N_4 = 1.57 \frac{\text{сост.}}{\text{эВ яч.}}$; $\Delta N_5 = 0.41 \frac{\text{сост.}}{\text{эВ яч.}}$; $\langle \omega \rangle = 314 \text{ К}$, $V = 0.12$.

Таким образом,

$$T_C = 1.14 \cdot 314 \exp \left[-1/[5.44 + 0.99(1-x) + 0.58(1-x)\eta] \right]. \quad (5)$$

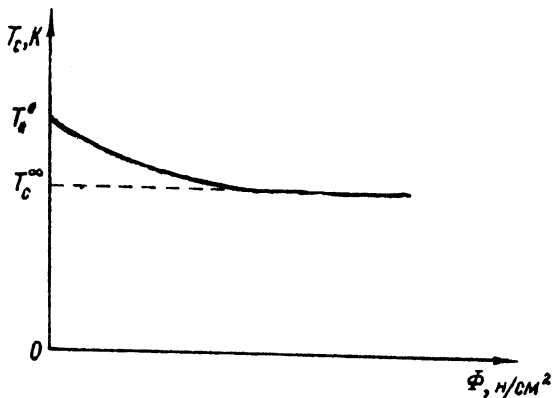


Рис. 2. Изменение T_c в зависимости от дозы при электронном облучении, смещающем атомы кислорода.

Результаты расчетов по этой формуле представлены на рис. 1.

Отметим, что сечение этой поверхности плоскостью, перпендикулярной оси 1-2, дает кривую Батлогга-Кавы и др. (ср. с [2]), а сечение плоскостью, перпендикулярной оси X (при $x=0.45$), дает результаты [3].

Любопытно, что на кривой Батлогга-Кавы есть „полочка“ (между x_1 и x_2). В нашей модели ее легко получить, если полагать $N(E_F) = const$, т.е. в том случае, если уменьшение 7-х (уход кислорода из образца) приводит к упорядочению кислорода. А в принципе подобное поведение системы знакомо: оно соответствует переходу Вигнера (упорядочение с уменьшением плотности) [5].

Применим теперь предлагаемую модель к анализу влияния на ВТСП внешних воздействий.

Радиационное воздействие. Будем воздействовать на $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ таким излучением, которое смещает атомы кислорода из позиций O4 и O5 (например, электронами средних энергий); кроме того, будем считать, что междоузельные позиции O нестабильны, так что, по существу, облучение перетуссовывает атомы O между позициями O4 и O5.

Уравнение кинетики имеет вид

$$\frac{dn_4}{dt} = -\lambda_{45}n_4 + n_5/\tau_{54}, \quad \frac{dn_5}{dt} = -\lambda_{54}n_5 + n_4/\tau_{45}, \quad (6)$$

где первые члены соответствуют смещению атомов из своих позиций под действием радиации; вторые члены – тепловым релаксациям атомов O.

При начальных условиях $t=0, n_4 = n_4^0, n_5 = n_5^0$ имеем

$$n_4 + n_5 = n_4^0 + n_5^0 = (1-x); \quad n_4 - n_5 = (1-x)\eta, \quad (7)$$

$$n_4 = n_4^0 + \frac{n_0}{1 + \lambda_{45} \tau_{54}} \left[1 - e^{-t(\lambda_{45} + 1/\tau_{54})} \right],$$

$$n_5 = n_5^0 + \frac{n_0}{1 + \lambda_{54} \tau_{45}} \left[1 - e^{-t(\lambda_{54} + 1/\tau_{45})} \right].$$

Подставляя величину ρ из (7) в (5), находим дозовую зависимость $T_c(\Phi)$, где $\Phi = Jt$, J - интенсивность облучения (рис. 2), что отражает экспериментальные закономерности [6].

Отметим, что такая трактовка справедлива только в отношении монокристаллов. А в случае, когда радиационному воздействию подвергаются ВТСП керамики, на первый план выходят совершенно иные эффекты. Зондаж свойств этих объектов можно осуществить, в частности, по степени повреждаемости джозефсоновских контактов, роль которых в случае керамик подчас не последняя.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Novel Mechanisms of Superconductivity / Ed by S. Wolf, V. Kresin. N.-Y: Plenum Press, 1987.
- [2] C a v a R., B a t l o g g B., C h e n C. et al.// Phys. Rev. 1987. В36. P. 5719.
- [3] Э м В.Г., Л а т е р г а у с И.С., Т а ш м е т о в М.Ю. и др. // Препринт ИЯФ АН РУз. P-9-535. Ташкент, 1991. 12 с.
- [4] H e r m a n F., K a s o w s k i R., H s u W.// Phys. Rev. 1987. В36. P. 6904.
- [5] П а й н с Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М.: Мир, 1965.
- [6] К р у л и к о в с к а я М.П. и др. Радиационные эффекты в ВТСП-оксидах. Препринт № 21 Института физики АН УССР. Киев. 1990.

Поступило в Редакцию
24 декабря 1992 г.