

01;05.4

©1995

**АНОМАЛЬНАЯ
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ
ТЕПЛОЕМКОСТИ СВЕРХПРОВОДНИКОВ
ТИПА $\text{La}_{2-\alpha}\text{MCuO}_4$**

С.В.Гущин, С.Джуманов

В многочисленных экспериментах, проведенных к настоящему времени, установлено, что в области низких температур сверхпроводники типа $\text{La}_{2-\alpha}\text{MCuO}_4$ и $\text{LnBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ обладают линейной зависимостью теплоемкости от температуры [1]. Подобное поведение не находит объяснения в рамках классической теории сверхпроводимости, созданной Бардиным–Купером–Шриффером. В этой связи в [2] была предложена теория поляронов малого радиуса, которые приводили к двухъямным потенциалам для гибридных мод колебаний в сверхпроводниках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, и вибранный механизм спаривания в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, изложенный в [3], где тоже было показано возникновение двухъямного потенциала для вибранных колебаний. Появление такого потенциала позволяет на основе теории, развитой для низкотемпературной теплоемкости стекол [4] и обобщенной для высоких температур в [5,6], понять возникновение линейной зависимости от температуры такой термодинамической характеристики, как теплоемкость. Проведенный в [2,3] анализ касался молекул симметрии C_{4v} и орторомбической симметрии, содержащих атомы меди в центре молекулы, что

являлось рещаемым фактором в получении двухъямного потенциала. В этой связи представляется интересным проведение исследования сверхпроводников типа $\text{La}_{2-\alpha}\text{M}\text{CuO}_4$ с симметрией D_{4h} без атомов меди в центре молекулы.

Целью настоящей работы является исследование сверхпроводников указанного вида. Основное внимание уделяется колебаниям атомов кислорода, расположенным в вершинах квадрата. Колебания подобных систем хорошо изучены [7,8]. В частности, известно, что для молекул симметрии D_{4h} двумерное колебание, описывающее колебание на плоскости, содержит полносимметричное колебание, не изменяющее форму молекулы, и два неполносимметричных колебания или: $[E]^2 = A_1 \cdot B_{1g} \cdot B_{2g}$, где E — двумерное колебание, A_1 — одномерное полносимметричное колебание, B_{1g} и B_{2g} — одномерные неполносимметричные колебания, искажающие форму молекулы. Потенциальная энергия, записанная в матричном виде в пространстве электронных функций, имеет вид

$$U = \frac{1}{2} (\omega_1^2 Q_1^2 + \omega_2^2 Q_2^2) + V_1 Q_1 \delta_x + V_2 Q_2 \delta_y, \quad (1)$$

обозначения по [8], и адиабатический потенциал

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{1}{2} (\omega_1^2 Q_1^2 + \omega_2^2 Q_2^2) \pm (V_1^2 Q_1^2 + V_2^2 Q_2^2)^{1/2}, \quad (2)$$

критические точки поверхности ε^- , найденные в [8], имеют следующие значения:

$$Q_1 = \pm V_1 / \omega_1^2, \quad Q_2 = 0, \quad \varepsilon(Q) = -\frac{1}{2} V_1^2 / \omega_1^2, \quad E_{JT}^{(1)} = \frac{1}{2} V_1^2 / \omega_1^2,$$

$$Q_1 = 0, \quad Q_2 = \pm V_2 / \omega_2^2, \quad \varepsilon(Q) = -\frac{1}{2} V_2^2 / \omega_2^2, \quad E_{JT}^{(2)} = \frac{1}{2} V_2^2 / \omega_2^2. \quad (3)$$

Рассмотрим одну из этих точек, например $Q_1 = V_1 / \omega_1^2$, $Q_2 = 0$, и выясним поведение ангармонического потенциала, отвечающего за колебания Q_1 и Q_0 , где Q_0 — колебания, соответствующие полносимметричным колебаниям. Введение ангармонизма при рассмотрении подобных полносимметричных колебаний вполне обосновано, так как всякий физический потенциал имеет конечную глубину.

Учитывая центросимметричность молекулы CuO_4 , уравнение содержит ангармонические члены лишь с четными степенями по координатам и имеет вид

$$V(Q_1, Q_0) = \frac{1}{2} K_{11} Q_1^2 + \frac{1}{2} K_{00} Q_0^2 + K_{111} Q_1^4 + K_{0000} Q_0^4 + \frac{1}{2} (K_{1100} + K_{0011}) Q_1^2 Q_0^2, \quad (4)$$

где K_{ij} — константы ангармонизма молекулы. Полученный вид уравнения соответствует редукции симметрии молекулы от D_{4h} к D_{2h} в экстремальной точке, что для данных значений экстремума означает преобразование квадратной молекулы в ромбическую. Минимизируя (4) по Q_0 , получим уравнение

$$K_{00}Q_0 + 4Q_{0000}^3 + (K_{1100} + K_{0011})Q_1Q_0 = 0. \quad (5)$$

Уравнение (5) легко решается и его корни

$$Q_0^{(1)} = 0; \quad Q_0^{(2,3)} = \mp \{Q_1^2(K_{1100} + K_{0011}) + K_{00}\}^{1/2} (4K_{0000})^{-1/2}, \quad (6)$$

т. е. одно тривиальное решение и решения, соответствующие двухъямному потенциалу, при

$$Q_1^2(K_{1100} + K_{0011}) + K_{00} < 4K_{0000}. \quad (7)$$

Полученный двухъямный потенциал определяет по стандартной формуле температурную зависимость теплоемкости: $C = \frac{\pi}{6} T n(u)$, где $n(u)$ — плотность состояний, а T — температура. То есть можно утверждать, что при выполнении условия (7) возникает двухъямный потенциал, приводящий к возникновению линейной зависимости теплоемкости от температуры.

При рассмотрении были использованы значения $Q_1 \neq 0$ и $Q_2 = 0$, что соответствует абсолютному минимуму, если $E_{JT}^{(1)} > E_{JT}^{(2)}$. В случае $Q_1 = 0$, а $Q_2 \neq 0$ экстремальной точке отвечает седлообразная точка, при этом могут быть получены выражения, аналогичные (6) и (7), которые, однако, не дадут вклада в теплоемкость, так как седлообразная точка является неустойчивой и малейшие возмущения уведут систему из экстремальной точки. При $E_{JT}^{(2)} > E_{JT}^{(1)}$ положение меняется, линейная зависимость теплоемкости от температуры существует при условии $Q_2^2(K_{2200} + K_{0022}) + K_{22} < 4K_{2222}$. При этом молекула деформируется из квадратной в прямоугольную. В проведенном рассмотрении подразумевалась низкотемпературная область, так как поведение системы изучалось в экстремальных точках, в которых одно из колебаний вымерзает, а второе существенным образом деформирует молекулу, что является определяющим для формы ангармонического потенциала и значений констант, которые в него входят.

Обобщим полученные результаты. Была исследована теплоемкость сверхпроводников типа $\text{La}_{2-x}\text{M}\text{CuO}_4$. Показано, что в экстремальной точке адиабатического потенциала,

при редукции симметрии молекулы от D_{4h} к D_{2h} , возможно существование двухъямного потенциала, возникающего при учете ангармонизма полносимметричных и неполносимметричных колебаний, найдены соотношения для констант ангармонизма, определяющих подобную возможность. Впервые исследовалась молекула, не содержащая атомов меди в центре квадрата, образованного атомами кислорода.

Полученные результаты могут быть использованы при изучении термодинамических свойств новых сверхпроводников.

Список литературы

- [1] Лазарев В.Б., Гавричев К.С., Горбунов В.Е., Гринберг Я.Х., Слуцкий П.З. // Журн. неорганической химии. 1990. Т. 35. В. 1. С. 3–11.
- [2] Szymczak H., Canzel Z., Wittlin A. // Int. Journal of Modern Physics. 1990. V. 4. P. 1369–1378.
- [3] Borisov M., Georgiev M. // Philosophical Magazine. 1989. V. 60. P. 293–306.
- [4] Anderson P.W., Halperin B.J., Varma C.M. // Philosophical Magazine. 1972. V. 25. P. 1–9.
- [5] Карпов В.Г., Клингер М.И., Игнатьев Ф.Н. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 760–775.
- [6] Паршин Д.А. // ФТТ. 1994. С. 1809–1880.
- [7] Clougherty D.P., Jonson K.N., McHenry M.E. // Physica C. 1989. V. 162–164. P. 1475–1476.
- [8] Берсукер И.Б., Полингер В.З. // Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. М.: Наука, 1983. С. 336.

Институт ядерной физики
АН РУз
Ташкент

Поступило в Редакцию
26 июня 1995 г.