

[5] *Бажанова Н. В., Ильющин А. С., Кадомцева А. М.* и др. Кристаллография, 1976, т. 21, № 2, с. 339—341.

[6] *Белов К. П., Свирина Е. П., Шлягина Л. П.* ФТТ, 1984, т. 26, № 6, с. 1903—1906.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
2 мая 1988 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела, том 30, в. 12, 1988

Solid State Physics, vol. 30, № 12, 1988

ПОВЕДЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ ПРИ СТРУКТУРНОМ ПЕРЕХОДЕ В КЕРАМИКАХ $ABa_2Cu_3O_{6.5+x}$

Ю. М. Иванченко, А. А. Лисянский, А. Э. Филиппов

В последнее время исключительный интерес вызывает исследование свойств керамик с общей структурой $ABa_2Cu_3O_{6.5+x}$, где $A=Y, La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Ce, Pr, Tb, Lu$, вызванный недавним открытием в ряде из них высокотемпературного сверхпроводящего перехода [1, 2]. Было замечено, что сверхпроводящие свойства керамик $A-Ba-Cu-O$ тесно связаны с наличием при температурах порядка 700 °C структурного фазового перехода из тетрагональной в орторомбическую фазу [2, 3]. Установлено, что температура сверхпроводящего перехода T_c близка к 90 К для образцов, содержащих $A=Y, La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm$ и Yb , претерпевающих указанное структурное превращение, тогда как для веществ с $A=Ce, Pr$ и Tb , где такого превращения нет, эта температура оказывается крайне низкой (например, $T_c \approx 4.2$ К у $PrBa_2Cu_3O_{6.5+x}$ [3]). Такой же структурный переход из тетра- в ортофазу имеется и в сверхпроводящих системах на базе La_2CuO_4 [4]. Помимо этого установлено, что температура окончания сверхпроводящего перехода возрастает с увеличением степени орторомбичности структуры $\epsilon = 2(a-b)/(a+b)$, где a, b — параметры ромбической ячейки в плоскости, перпендикулярной оси c [5]. Причем ширина перехода ΔT убывает с ростом ϵ от $\Delta T > 20$ К для $A=Nd$ до $T \leq 10$ К для $A=Y, Sm, Ho, Er$ [3]. Это согласуется также с эффектом замещения атомов Cu кобальтом малой концентрации, при котором величина ϵ убывает и одновременно снижается T_c [6]. При всестороннем сжатии (одновременное уменьшение a и b) параметр ϵ нарастает, что должно сопровождаться и ростом T_c , и уменьшением ширины перехода; это согласуется с результатами экспериментов в работе [7]. Дополнительный эффект увеличения орторомбичности можно достигнуть одноосным сжатием. При этом происходит также ориентация кристаллических гранул в поликристаллических образцах. В результате ширина сверхпроводящего перехода становится порядка 20 К [8].

Принимая во внимание описанную корреляцию между T_c и температурными изменениями параметров решетки a и b сверхпроводящих керамик, представляется полезным проанализировать эти изменения с точки зрения теории фазовых переходов. Поскольку наиболее полные экспериментальные данные в литературе имеются для керамики $YBa_2Cu_3O_{6.5+x}$, то конкретный анализ будет выполнен на этом примере, хотя он аналогичен и для остальных изоморфных соединений.

Рентгеноструктурные [9] и нейтронографические [10] эксперименты показывают, что при структурном фазовом переходе в $YBa_2Cu_3O_{6.5+x}$ керамике симметрия кристалла понижается от тетрагональной (группа $P4/mmm$) до орторомбической ($Pmmm$). Группа симметрии $Pmmm$ низкотемпературной фазы является подгруппой $P4/mmm$, так что в рамках тео-

рин Ландау можно ожидать фазового перехода второго рода. Ниже точки перехода температурная зависимость параметров решетки $a=a(T)$ и $b=b(T)$ различна. В качестве компонент параметра порядка φ удобно выбрать отклонения величин $a(T)$ и $b(T)$ от значения обоих параметров a и b в точке перехода $a=b=a_0$. В данном случае из двух компонент $\varphi_{1,2}$ вектора φ можно составить пару инвариантов $(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) = \varphi^2$ и $\varphi_1^2 \varphi_2^2$, тогда изменение свободной энергии данной системы записывается в виде следующего разложения Ландау:

$$F_0 = \frac{a\tau}{2} \varphi^2 + \frac{1}{4} u (\varphi^2)^2 + \frac{v}{2} \varphi_1^2 \varphi_2^2, \quad (1)$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$. Поведение $a(T)$ и $b(T)$ в орторомбической фазе качественно описывается решением $\varphi_1^2 = \varphi_2^2 = -a\tau/(2u+v)$ уравнений $\partial F_0/\partial \varphi_i = 0$. Однако данное решение дает плохое количественное согласие с экспериментальными кривыми $a(T)$ и $b(T)$. Наиболее вероятная причина расхождения состоит в следующем. При понижении температуры от 700 до 400 °C система $YBa_2Cu_3O_{6.5+x}$ интенсивно теряет кислород, что существенно сказывается на всех ее параметрах [10]. В частности, эффективные параметры разложения Ландау u и v , так же как и среднее значение постоянной решетки a_0 , зависят от концентрации x кислорода, адсорбированного керамикой при данной температуре. Функция $x(T)$ является практически линейной [10]. Используя малость отношения $x/6.5$, можно считать $2u+v$ и a_0 приближенно линейными функциями температуры. В результате для $a(T)$ и $b(T)$ имеют место формулы

$$a(T) = a_0 - A\tau - \rho \sqrt{\tau/(1+\kappa\tau)}, \quad b(T) = a_0 - A\tau + \rho \sqrt{\tau/(1+\kappa\tau)}. \quad (2)$$

Зависимость $a_0(T) = a_0 - A\tau$ можно определить по известному поведению постоянной решетки a выше точки перехода, так что окончательно имеются два подгоночных параметра ρ и κ . Кривые $a(T)$ и $b(T)$ изображены на рисунке штриховыми линиями. Дальнейшее улучшение согласия с экспериментом достигается учетом взаимодействия параметра порядка φ с компонентами тензора напряжений, связанных с деформациями $u_{ik} = -\partial F/\partial \sigma_{ik}$, возникающими при трансформации решетки ниже T_c . Для этого свободную энергию следует дополнить ($F = F_0 + \Delta F$) выражением для ΔF

$$\Delta F = - \sum_i [(g + r_1 \varphi_i^2 + r_2 \varphi_{j \neq i}^2) \varepsilon_{ii} - (s_1/2) \varepsilon_{ii}^2] - r_3 \varphi_1 \varphi_2 \varepsilon_{xy} - (s_2/2) \varepsilon_{xy}^2 - s_3 \varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy}. \quad (3)$$

Функция $a_0(T) = a_0 - A\tau$ определяется величиной коэффициента теплового расширения K_{ii} . Наличие перекрестных слагаемых в (3) приводит к появлению добавки к нему $\Delta K_{ii} = (2r_1 + r_2) d\varphi_i^2/dT$, которая наиболее существенно искажает структуру кривых $a(T)$ и $b(T)$ в непосредственной окрестности точки перехода. Формулы (2) трансформируются следующим образом:

$$a(T) = a_0 - A(\tau + \Delta\tau/(1+\kappa\tau)) - \rho \sqrt{\tau/(1+\kappa\tau)}, \quad b(T) = a(T) + 2\rho \sqrt{\tau/(1+\kappa\tau)}.$$

Соответствующие кривые показаны на рисунке сплошными линиями. Наилучшее приближение к экспериментальным данным работы [8], в частности, достигается при $\rho \simeq 0.12$, $\kappa \simeq 10.3$, $\Delta \simeq 0.77$.

Интересно отметить, что форма (1) соответствует разложению для кубически анизотропных систем с двухкомпонентным параметром порядка.

Для систем такой симметрии наличие развитых критических флуктуаций может приводить к изменению рода фазового перехода со второго на первый с небольшим скачком параметра порядка. Наличие или отсутствие условий для этого явления должно быть чувствительно к технологии приготовления образцов. С этим обстоятельством, возможно, связаны имеющиеся в литературе разногласия по вопросу о роде структурного фазового перехода в керамике $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5+x}$ (см., например. [11]).

Л и т е р а т у р а

- [1] *Wu M. K., Ashburn J. R. et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 9, p. 908—910.
- [2] *Tsurumi S., Hikita M. et al.* Jap. J. Appl. Phys., 1987, vol. 26, N 5, p. L856—L857.
- [3] *Блиновсков Я. Н., Леонидов И. А.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46 (Приложение), с. 11—14.
- [4] *Андреев А. В., Бурханов А. М.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46 (Приложение), с. 192—195.
- [5] *Бущ А. А., Гордеев С. Н.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46 (Приложение), с. 204—207.
- [6] *Shindo D., Hiraga K. et al.* Jap. J. Appl. Phys., 1987, vol. 26, N 10, p. L1667—L1669.
- [7] *Будько С. Л., Гапотченко А. Г.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46 (Приложение), с. 226—227.
- [8] *Otori M., Tomiyoshi S. et al.* Jap. J. Appl. Phys., 1987, vol. 26, N 8, p. L1421—L1423.
- [9] *Сухаревский Б. Я., Шаталова Г. Е.* и др. ФНТ, 1987, т. 13, № 9, с. 992—995.
- [10] *Jorgensen J. D., Beno M. A. et al.* Phys. Rev. B, 1987, vol. 36, N 7, p. 3608—3616.
- [11] *Ng H. K. et al.* Sol. St. Commun., 1988, vol. 65, N 1, p. 63—66.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
1 июня 1988 г.

УДК 548.4 : 539.2

Физика твердого тела, том 30, в. 12, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 12, 1988

К УТОЧНЕНИЮ ЗАКОНОВ НАСЛЕДОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ ПРИ БОЛЬШИХ ОДНОРОДНЫХ ДЕФОРМАЦИЯХ

В. А. Стрельцов

В работах [1⁻⁵] была сформулирована континуальная теория наследования дефектов и их плотностей при превращениях твердого тела. Под превращением понимается либо фазовое превращение мартенситного (бездиффузионного) типа, либо сжатие высоким и сверхвысоким гидростатическим давлением. Одним из основных следствий теории явились законы преобразования дефектов твердого тела после изменения метрики пространства, которая соответствует однородной деформации. Полученные общие законы преобразования, или законы наследования одиночных дисклинаций с вектором Франка \mathfrak{U} и дислокаций (в среде с дисклинациями) с вектором Бюргера \mathbf{B} , по необходимости включали в себя соответствующие добавки \mathfrak{U}^* и \mathbf{B}^*

$$\Omega_k = \frac{K_{ik}}{|K|} (\Omega_i^{(0)} + \Omega_i^*), \quad B_{ik} = K_{ik} (B_i^{(0)} + B_i^*), \quad (1)$$

которые появляются из-за взаимодействия дисклинаций, находившихся изначально в теле, с однородной деформацией. Эти добавки определяются так [1⁻⁵]:

$$\Omega_i^* = \oint_L d\omega_i^*, \quad \omega_i^* = \epsilon_{imn} u_n^{(0)} G_{pm}, \quad (2a)$$

$$B_i^* = -\epsilon_{qnm} x_m [K_{pn}^{-1} K_{pi}^{-1} (\Omega_q^{(0)} + \Omega_q^* + \Omega_n^{(0)} \delta_{iq}^{-1})]. \quad (26)$$