

01;05.4

©1994

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ СТРУКТУРЫ $YBa_2Cu_3O_{7-x}$

*Б.Л.Оксенгендлер, В.Я.Гольдман, З.И.Каримов,  
М.С.Юнусов*

Нестехиометричность ВТСП материалов по кислороду, большая подвижность атомов кислорода в структуре ВТСП, существование сильной электрон-фононной связи в этих материалах позволяют ожидать проявления специфических эффектов, связанных с обменом атомами кислорода ВТСП материала и окружающей среды. По-видимому, один из эффектов подобного рода был обнаружен в работе [1], авторы которой на основе рентгеновских исследований открыли спонтанные осцилляции структуры  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  с периодом примерно 1 ч.

Интерпретация этого эффекта может быть получена на основе идей о синергетическом (см. [2]) поведении системы  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  (кристалл), открытой в смысле обмена с окружающей средой как энергией, так и массой (кислород).

Будем исходить из следующей картины. Рассмотрим кристалл  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  в совокупности с богатой кислородом окружающей средой. Процесс вхождения внешних атомов кислорода в кристалл характеризуется большим временем ( $\tau_D$ ), обусловленным эффектом диффузионного насыщения кислородом. Попавшие внутрь кристалла “внешние” атомы кислорода будут распределяться по кислородным позициям, приводя кристалл к степени дальнего порядка, равновесного для данной температуры. Величина параметра порядка  $\eta$  характеризует усредненную по кристаллу степень асимметрии элементарной ячейки. На установление дальнего порядка также требуется время ( $\tau_\eta$ ), которое, конечно, гораздо меньше, чем  $\tau_D$ ,  $|\tau_D \ll \tau_\eta|$ . Попав в равновесные удельные позиции, кислород вступает в химическое взаимодействие с атомами Cu. При этом заполнение антисвязанных состояний на поверхности Ферми позволяет реализоваться эффекту Яна-Теллера в каждой ячейке. Ян-Теллеровская деформация каждой ячейки, наступающая почти мгновенно ( $\tau \sim 10^{-13}$  с) после заполнения соответствующих “Cu-O”-орбиталей, резко меняет величину растворимости по кислороду ( $N_0(\eta)$ ), так что вошедший кислород оказывается уже неравновесным и должен уйти за

диффузионное время  $\tau_D$ , которое, конечно, зависит от упорядоченности образца, т.е.  $\tau_D = \tau_D(\eta)$ . Уход кислорода понижает положение уровня Ферми  $E_F$ , Ян-Теллеровские орбитали оказываются "оголенными", и кристалл возвращается в исходное состояние — один цикл завершен.

Оформим это соображение математически.

Кинетика указанных процессов описывается уравнениями

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -a \left[ \frac{\gamma}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right)} - 1 \right] \eta - b\eta^3;$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \tau_D^{-1} (N_0(\eta) - N).$$

Здесь  $N$  — концентрация кислорода в момент времени  $t$ ; свободная энергия системы выбрана в виде Ландау-Гинзбурга  $F = F_0 + a\eta^2 + b\eta^4$ . Коэффициент  $b$  считается независимым от изменяющихся параметров системы, коэффициент  $a$  зависит от положения уровня Ферми через величину  $\gamma$ , связанную с выбранной константой связи Cu-O;  $F_i$  — энергия орбитали Cu-O, перезаряжающейся при колебаниях уровня Ферми. Величина  $\gamma$ , являющаяся постоянной эффекта Яна-Теллера в кристалле, такова, что при пересечении уровнем Ферми области энергий, близких к  $E_i$ , знак квадратной скобки в уравнении для  $\frac{\partial \eta}{\partial t}$  меняется, т.е.  $\gamma \sim 2$ . Таким образом, при  $E_i > E_F$   $a > 0$ , а при  $E_i < E_F$   $a < 0$ .

Учтем теперь, что  $E_F = E_F(N)$  (например,  $E_F \sim N^{2/3}$ ), т.е.  $(\partial E_F / \partial N) > 0$ . Стационарные значения  $N^*$  и  $\eta^*$  определяются уравнениями  $(\partial N / \partial t) = 0$  и  $(\partial \eta / \partial t) = 0$ .

В линейном приближении  $N = N^* + \delta N$  и  $\eta = \eta^*$ , так что

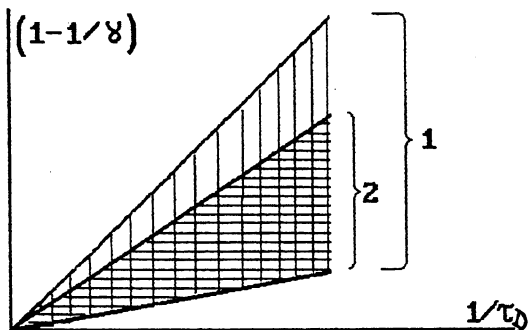
$$\frac{d\eta}{dt} = M_{11}\delta N + M_{12}\delta\eta;$$

$$\frac{dN}{dt} = M_{21}\delta N + M_{22}\delta\eta,$$

где

$$M_{11} = \frac{-a\eta^*(\gamma - 1)}{kT\gamma} \left( \frac{\partial E_F}{\partial \eta} \right), \quad M_{12} = \frac{-a\eta^*(\gamma - 1)}{kT\gamma} \left( \frac{\partial E_F}{\partial N} \right),$$

$$M_{21} = \frac{1}{\tau_D}, \quad M_{22} = \frac{1}{\tau_D} \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right) \text{ и } \frac{\partial E_F}{\partial \eta} = \left( \frac{\partial E_F}{\partial N} \right) \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right).$$



В рамках линейной теории устойчивости находим условия существования автоколебаний в системе

$$\left[ \alpha \left( \frac{\partial E_F}{\partial \eta} \right)_{\eta^*} - \frac{1}{\tau_D} \right]^2 - \frac{4\alpha}{\tau_D} \left( \frac{\partial E_F}{\partial \eta} \right)_{\eta^*} \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right) < 0,$$

$$\alpha = \frac{a\eta^*(\gamma - 1)}{kT\gamma}.$$

Автоколебания устойчивы при инкременте:

$$\lambda = -\frac{1}{2} \left[ \alpha \left( \frac{\partial E_F}{\partial \eta} \right)_{\eta^*} + \frac{1}{\tau_D} \right] < 0.$$

Решая эти неравенства, находим соотношения времени диффузионного вхождения атомов кислорода в образец  $\tau_D$  и параметра Ян-Теллеровского перехода, при которых автоколебания существуют и являются устойчивыми:

$$\begin{aligned} \frac{2}{\alpha} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{1}{4} \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right)^{-2} \right)^{1/2} \right] &< \left[ \tau_D \left( 1 - \frac{1}{\gamma} \right) \right] < \\ &< \frac{2}{\alpha} \left[ 1 + \left( 1 - \frac{1}{4} \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right)^{-2} \right)^{1/2} \right]; \\ \left[ \tau_D \left( 1 - \frac{1}{\gamma} \right) \right] &< -\alpha \left( \frac{\partial N_0}{\partial \eta} \right). \end{aligned}$$

Выполнение этих соотношений демонстрирует рисунок, на котором область 1 соответствует существованию спонтанных автоколебаний структуры  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , а область 2 — их устойчивости. Отметим, что при выполнении условия

$$-(\partial N_0/\partial \eta)^{-1} > 2 \left[ 1 + (1 - 0.25(\partial N_0/\partial \eta)^{-2})^{1/2} \right]$$

автоколебания оказываются устойчивыми во всей области параметров.

Таким образом, проведенный анализ действительно указывает на возможность существования спонтанных автоколебаний в  $\text{YBa}_3\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  между состояниями с симметричной и несимметричной элементарными ячейками, причем реализация автоколебаний определяется соотношением между температурой кристалла, характером изменения равновесной растворимости кислорода при изменении параметра порядка  $\partial N_0/\partial \eta$ , временем диффузионного вхождения кислорода в кристалл  $\tau_D$  и параметром Ян-Теллеровского взаимодействия  $\gamma$ .

#### Список литературы

- [1] Романов Е.П., Сударева С.В., Нугаева Л.Л., Кобелев Л.Я. // ФММ. 1990. В. 5. С. 122-127.
- [2] Хакен Х. Синергетика: иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М., 1985.

Отдел теплофизики  
Ташкент, Узбекистан

Поступило в Редакцию  
29 апреля 1994 г.