

05.3;05.4

## ВЛИЯНИЕ ИНДУЦИРОВАННЫХ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ НА ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

© С.В.Гущин

В предыдущей нашей работе [1] была исследована аномальная температурная зависимость теплоемкости в высокотемпературных сверхпроводниках  $\text{La}_2\text{MCuO}_4$ , где было показано, что при структурном переходе от симметрии  $D_{4h}$  к симметрии  $D_{2h}$  возникают условия для существования двухъямного потенциала, определяющие указанную аномалию. Данная структура не единственно возможная для этого соединения. Допустимые типы симметрий  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  были рассмотрены в [2], и там же отмечено, что возможно существование, кроме указанных выше, структур с симметриями:  $D_4$ ,  $C_4$ ,  $4D_{2d}$ ,  $D_2$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_s$ . Поэтому представляет интерес изучение тепловых свойств и для других структурных фаз.

Прежде всего, следует отметить следующее: исходная структура  $D_{4h}$  обладает центром симметрии, поэтому температурный или деформационный структурный переходы возможны лишь в центросимметричные фазы. Переход в структуры с симметрией  $C_4$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_s$  возможен лишь в результате электромагнитного воздействия, например гамма-индуцированный структурный переход, механизм рассмотрен в [3]. Возможность структурного перехода для рассматриваемого высокотемпературного сверхпроводника обсуждалась в [4]. В этом случае возникает двухфазная структура с симметрией  $D_{2h}$  и симметрией  $C_{2v}$ , рассматривается, как и в [1], конфигурация, не содержащая атом меди в центре четырехугольника, образованного атомами кислорода. В низкосимметричной структуре адиабатический гамильтониан [4] в базисе электронных функций имеет вид

$$H(Q) = 1/2(P_1^2 + \omega_1^2 Q_1^2) \epsilon_0 + V_1 Q_1 \sigma_z, \quad (1)$$

обозначения по [1]. В этом случае матрица потенциальной энергии диагональна и адиабатические потенциалы равны:

$$\epsilon_{+-} = 1/2\omega_1^2 Q_1^2 + V_1 Q_1. \quad (2)$$

То есть из знания адиабатического потенциала, который в этом случае совпадает с потенциальной энергией ядер при

любых значениях констант связи, можно определить значения амплитуды нормальных колебаний  $Q_1$ . Рассмотрим ангармонический потенциал для всех нормальных колебаний: полносимметричных  $Q_0$  и неполносимметричных  $Q_1$ . В этом случае, в отличие от рассмотренного в [1], необходимо учитывать кубические по амплитуде члены:

$$K_{00}Q_0^2 + K_{11}Q_1^2 + K_{000}Q_0^3 + K_{011}Q_0Q_1^2 + K_{0000}Q_0^4 + K_{1111}Q_1^4 + K_{0011}Q_0^2Q_1^2 = H, \quad (3)$$

минимизируя по  $Q_0$  ( $Q$  определено из (2)), имеем:

$$Q_0^3 + 3/4(K_{000}/K_{0000})Q_0^2 +$$

$$+ 2^{-1}(K_{00} + K_{0011}Q_1^2)K_{0000}^{-1}Q_0 + 4^{-1}K_{000}K_{0000}^{-1}Q_1^2 = 0, \quad (4)$$

$K_{ij}, K_{ijk}, K_{ijkl}$  — константы ангармонизма. После замены

$$Q_0 = X - 4^{-1}K_{000}K_{0000}^{-1} \quad (5)$$

уравнение (4) может быть преобразовано к виду

$$X^3 - dX + k = 0, \quad (6)$$

где

$$d = \left\{ 3/16(K_{000}/K_{0000})^2 - 1/2(K_{00}/K_{0000}) - 1/2(K_{0011}Q_1^2/K_{0000}) \right\},$$

$$k = \left\{ 1/32(K_{000}/K_{0000})^3 + 1/2(K_{00}K_{000}/K_{0000}^2) + K_{000}K_{0011}Q_1^2/K_{0000}^2 + K_{0011}Q_1^2/K_{0000} \right\},$$

при условии

$$dk = 0 \quad (7)$$

уравнение (5) имеет решение:

$$X_{1,2} = k^{1/3}/2 + (d - 3/4k^{2/3})^{1/2}, \quad (8)$$

т. е. возникает асимметричный двухъямный потенциал. Таким образом, в двухфазной среде  $\text{La}_2\text{MSuO}_4$  мы получили два различных по форме двухъямных потенциала. При этом считаем, что асимметрия возникшего двухъямного потенциала меньше туннельного расщепления уровней в полученном потенциале, это обязательное приближение для двух уровневых систем, в котором проводится рассмотрение.

Таким образом, можно отметить, что в связи со структурной перестройкой возникло два типа двухуровневых систем, относящихся к симметрии:  $D_{2h}$  — симметричный потенциал и асимметричный потенциал, относящийся к структуре  $C_{2v}$ . При этом различные типы потенциалов не сказываются на характере температурной зависимости теплоемкости. Это связано с тем, что теплоемкость пропорциональна плотности состояний двухуровневых систем, которая, в свою очередь, слабо, логарифмически, зависит от энергии расщепления, т. е. асимметрия не влияет на теплоемкость [6]. Вместе с тем в [7,8] отмечено, что наличие двух различных двухуровневых систем изменяет тепловыделение. Температурная зависимость функции распределения температуры замерзания, температуры кроссовера, приобретает при этом два максимума. Появление этих максимумов связано с различной асимметрией потенциалов, так как асимметрия определяет температуру кроссовера.

Для симметричного потенциала  $D_{2h}$  асимметрия возникает лишь при учете ангармонизма шестой степени. Уравнение (4) из [1] преобразуется к виду

$$\begin{aligned} V(Q_0 Q_1) = & 1/2 K_{00} Q_0^2 + 1/2 K_{11} Q_1^2 + \\ & + K_{0000} Q_0^4 + K_{1111} Q_1^4 + 1/2 K_{0011} Q_0^2 Q_1^2 + \\ & + K_{000000} Q_0^6 + K_{111111} Q_1^6 + \\ & + K_{001111} Q_0^2 Q_1^4 + K_{000011} Q_0^4 Q_1^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Минимизируя по  $Q_0$ , получим:

$$\begin{aligned} K_{00} Q_0 + 4K_{0000} Q_0^3 + K_{0011} Q_0 Q_1^2 + \\ + 6K_{000000} Q_0^5 + 2K_{001111} Q_0 Q_1^4 + 4K_{000011} Q_0^3 Q_1^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет следующие решения:  $Q = 0$  и  $Q_{1,2} = +[-a/2 \pm (a^2/4 - b)^{1/2}]^{1/2}$ , при  $Q > 0$  и  $-a/2 > 0$

$$Q_{3,4} = - \left[ -a/2 \pm (a^2/4 - b)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (10)$$

где

$$a = (4K_{0000}) + K_{000011} Q_1^2 / 6K_{000000},$$

$$b = (K_{00} + K_{0011} Q_1^2 + 2K_{001111} Q_1^4) / 6K_{000000}.$$

Поэтому, учитывая различия в асимметриях потенциалов (8) и (10), следует ожидать изменение температурной зависимости функции распределения температуры замерзания при тепловыделении.

Можно сделать следующие выводы. Внешнее радиационное воздействие способно изменить структуру высокотемпературного сверхпроводника  $\text{LaMgCuO}_4$ , при этом изменяется форма двухъямного потенциала, что приводит к изменению характера тепловыделения в низкотемпературной области.

Полученные результаты могут быть использованы при изучении структурно-многофазных сверхпроводников.

#### Список литературы

- [1] *Гущин С.В., Джуманов С.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 19–20.
- [2] *Гуфан Ю.М., Мощенко И.Н., Окришвили И.Т., Рудашевский Е.Г., Снежков А.* // Кристаллография. 1995. Т. 40. № 1. С. 5–13.
- [3] *Хабибулаев П.К., Аскарлов В., Будревич А.Т., Оксенгендлер Б.Л., Паторуклов Ю.В., Тартаковская Е.В.* // Радиационные эффекты в многофазных гетерогенных диэлектриках / Под ред. П.К. Хабибулаева. Ташкент: Фан, 1988. С. 3–48.
- [4] *Гущин С.В.* // Тезисы 9 Междунар. конф. по радиационной физике и химии. Томск, 22–26 апреля 1996. С. 121.
- [5] *Берсукер И.Б., Полингер В.З.* Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. М.: Наука, 1983. 336 с.
- [6] *Карпов В.Г., Клиндер М.И., Игнатьев Ф.Н.* // ЖЭТФ. Т. 84. В. 2. С. 760–769.
- [7] *Дядина Г.А., Карпов В.Г., Соловьев В.Н.* // ФТТ. 1990. Т. 32. В. 9. С. 2661–2666.
- [8] *Паршин Д.А.* // ФТТ. 1994. Т. 36. В. 7. С. 1809–1880.

Институт ядерной физики  
АН Республики  
Узбекистан

Поступило в Редакцию  
7 октября 1996 г.