

О влиянии магнитного поля на структурные переходы в ВТСП

А. А. Мамалуй, И. Н. Саблин

*Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»
ул. Фрунзе, 21, г. Харьков, 61002, Украина
E-mail: mamalui@kpi.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 13 марта 2001 г., после переработки 28 апреля 2001 г.

Рассмотрен вопрос о влиянии механических напряжений, индуцированных пиннингом магнитного потока, на низкотемпературные структурные фазовые переходы в ВТСП системах. Модель применена к конкретному структурному переходу в $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ и позволяет описывать экспериментально наблюдаемые аномалии различных физических свойств, имеющих гистерезисное поведение в интервале температур 50–200 К. Произведена оценка исследуемого изменения положения границ гистерезисной области, обусловленного наличием магнитострикции.

Розглянуто питання про вплив механічних напружень, які індуковані пінінгом магнітного потоку, на низькотемпературні структурні фазові переходи у ВТНП системах. Модель застосована до конкретного структурного переходу в $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ і дозволяє описувати аномалії різних фізичних властивостей, що експериментально спостерігаються і мають гістерезисну поведінку в інтервалі температур 50–200 К. Зроблено оцінку досліджуваної зміни положення границь гістерезисної області, яка обумовлена наявністю магнітострикції.

PACS: 74.72.-h, 64.70.Kb

Введение

Характерной чертой высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) является наличие сильных ангармонических эффектов. Эта особенность проявляется, например, в колебательных модах апикального цепочечного кислорода в $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. При обсуждении механизмов ВТСП большое внимание уделяется рассмотрению роли решеточной ангармоничности и связанной с ней структурной неустойчивости [1]. Структурная неустойчивость $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ является, по-видимому, причиной аномалий, наблюдаемых в температурных зависимостях постоянных решетки, коэффициента теплового расширения в направлении ангармонических колебаний ионов кислорода, теплопроводности и других параметров [2–5]. В связи с возможностью структурных изменений в ряде работ изучалось влияние давления на значение критической температуры [6].

К числу внешних факторов, влияющих на структурный фазовый переход, относится также и магнитное поле [7,8]. Так, например, в соединении $BaTiO_3$, имеющем структуру перовскита и

поэтому подобном сверхпроводящим меднооксидам, магнитное поле величиной 20 Тл смещает такой переход из высокотемпературной неполярной фазы в сегнетоэлектрическую на 0,2–0,3 К в зависимости от используемой в эксперименте геометрии [8]. В работе [9] изучалась динамика сегнетоэлектрических межфазных границ в сильных магнитных полях, отмечено, что аналогичная ситуация возможна для ВТСП систем. В [8,9] предполагалось, что влияние магнитного поля обусловлено в основном магнитоэлектрическим эффектом, который доминирует над магнитострикцией, вследствие чего ею можно пренебречь. Однако наблюдаемый в ВТСП системах низкотемпературный структурный переход, происходящий при температуре ниже критической T_c , по-видимому, определяется эффектом, обусловленным значительной магнитострикцией, которая возникает в том числе и в результате пиннинга магнитного потока [10,11]. В настоящей работе исследуется влияние индуцированных пиннингом механических напряжений на структурный фазовый переход в ВТСП.

Описание модели

Рассмотрим сверхпроводник второго рода в виде бесконечной пластины толщиной $2d$, помещенный в магнитное поле B_a , параллельное его плоскости. Пластина расположена перпендикулярно оси z , ее середина находится в центре координат. Для описания электродинамики сверхпроводника предполагается применимой модель критического состояния. Пусть в начальный момент магнитное поле как внутри, так и снаружи образца равно нулю. Предположим также, что критический ток j_c не зависит от индукции магнитного поля. Уравнение Максвелла для определения индукции $B_z = B$ тогда имеет вид

$$\frac{dB}{dz} = \begin{cases} \mu_0 j_c, & (d-l) < z < d \\ 0, & |z| < (d-l) \\ -\mu_0 j_c, & -d < z < (l-d) \end{cases} \quad (1)$$

с граничным условием $B(\pm d) = B_a$, где μ_0 — магнитная проницаемость вакуума; $l = B_a/(\mu_0 j_c)$. С помощью уравнения (1) находим, что

$$B = \begin{cases} B_a - \mu_0 j_c (d-z), & (d-l) \leq z \leq d \\ 0, & |z| < (d-l) \\ B_a - \mu_0 j_c (d+z), & -d \leq z \leq (l-d) \end{cases} \quad (2)$$

Выражения для индуцированных пиннингом напряжений $\sigma(z)$ при данном распределении плотности магнитного потока $B(z)$, а также усреднения их вдоль оси z имеют вид [10]

$$\sigma = \frac{1}{2\mu_0} (B^2(z) - B_a^2) = \begin{cases} -B_a j_c (d-z) + \frac{1}{2} \mu_0 j_c^2 (d-z)^2, & (d-l) \leq z \leq d \\ -B_a^2/2\mu_0, & |z| < (d-l) \\ -B_a j_c (d+z) + \frac{1}{2} \mu_0 j_c^2 (d+z)^2, & -d \leq z \leq (l-d) \end{cases} \quad (3)$$

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{2\mu_0 d} \int_0^d (B^2(z) - B_a^2) dz = -\frac{B_a^2}{2\mu_0} + \frac{B_a^3}{6\mu_0^2 j_c d} \quad (4)$$

Приведенные формулы справедливы при $l \leq d$. В случае, когда это неравенство не выполняется, l в (2) и (3) необходимо заменить на d . Тогда вместо (4) имеем

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{6} \mu_0 j_c^2 d^2 - \frac{1}{2} B_a j_c d \quad (5)$$

Для исследования структурных фазовых переходов [12], в том числе и в ВТСП [13], используется модельный гамильтониан, вводимый с помощью представления о локальной нормальной координате (ЛНК), обозначаемой q_n ,

$$H = \sum_n \left(\frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 + V(q_n) \right) + \frac{1}{4} \sum_{n, n'} \Phi_{nn'} (q_n - q_{n'})^2 + H_d \quad (6)$$

где m — эффективная масса, соответствующая критической моде; $\Phi_{nn'}$ описывает связь смещений ЛНК; $V(q_n)$ — ангармоничный локальный потенциал, который взят здесь в форме $V(q_n) = (-A/2)q_n^2 + (B/4)q_n^4$; H_d — часть гамильтониана, задающего связь критической моды с деформацией решетки:

$$H_d = \sum_{n, \alpha} \frac{1}{2} M \dot{u}_\alpha^2(\mathbf{n}) + \frac{1}{2} \sum_{n, \alpha, \beta, \gamma, \delta} u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) u_{\gamma\delta}(\mathbf{n}) C_{\alpha\beta\gamma\delta} + \sum_{n, \alpha, \beta} u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) q_n^2 G_{\alpha\beta} - \sum_{n, \alpha, \beta} u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{n}), \quad (7)$$

где $u_{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ и $\dot{u}_\alpha(\mathbf{n})$ — смещение и скорость центра масс n -й ячейки с массой M ; $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ — коэффициенты жесткости; $G_{\alpha\beta}$ определяют связь мягкой моды и деформации.

Вычисляя свободную энергию в псевдогармоническом приближении и пренебрегая резонансными членами вида $\langle \delta q_n \delta u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \rangle$, в которые входят выделенные из q_n и $u_{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ флуктуационные части, из условия ее минимальности получаем следующие уравнения для равновесных значений $\langle q_n \rangle$ и $\langle u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \rangle$:

$$-A \langle q_n \rangle + B \langle q_n \rangle^3 + 3B \langle q_n \rangle \langle \delta q_n^2 \rangle + 2 \langle q_n \rangle \sum_{\alpha, \beta} \langle u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \rangle G_{\alpha\beta} + \sum_{n'} \Phi_{nn'} (\langle q_n \rangle - \langle q_{n'} \rangle) = 0; \quad (8)$$

$$\sum_{\gamma, \delta} \langle u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \rangle C_{\alpha\beta\gamma\delta} + (\langle q_n \rangle^2 + \langle \delta q_n^2 \rangle) G_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) = 0.$$

Другое приближение, использованное нами, состоит в том, что все характеризующие фононы величины вычисляются для «эффективного» кристалла. При этом в (8) величины $\langle q_n \rangle$, $\langle u_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \rangle$ и $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ заменяются на усредненные по объему $\langle \bar{q} \rangle$,

$\langle \bar{u}_{\alpha\beta} \rangle$, $\bar{\sigma}_{\alpha\beta}$, потом снова решается (8), но уже с локальными величинами. Тогда, например, в приближении среднего поля, применимость которого ограничена случаем дальнего действия, корреляционная функция будет определяться по формуле

$$\langle \delta q_n^2 \rangle = \langle \delta q^2 \rangle = \frac{1}{2\omega} \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T}, \quad (9)$$

в которой постоянная Больцмана принята равной единице. Уравнение для средней частоты колебаний имеет вид

$$m\omega^2 = \Delta^2 + \Phi_0, \quad (10)$$

где $\Phi_0 = \sum_{n'} \Phi_{nn'}$, а одночастичный потенциал определяется как

$$\Delta^2 = -A + 3B(\langle \bar{q} \rangle^2 + \langle \delta q^2 \rangle) + 2 \sum_{\alpha,\beta} \langle \bar{u}_{\alpha\beta} \rangle G_{\alpha\beta}. \quad (11)$$

Обсуждение результатов

Аномалии различных термодинамических и кинетических свойств $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ и их гистерезисное поведение в интервале температур 50–200 К [2–5] предположительно являются следствием происходящего в системе структурного фазового перехода первого рода [13]. В рамках принятой модели также возможно описать переход первого рода за счет учета влияния напряжений [14]. Вследствие того, что область, в которой наблюдается гистерезис, довольно широка, можно ожидать, что влияние напряжений будет существенным и приведет к большим значениям барической производной $\partial T_s / \partial P$, где T_s — температура структурного фазового перехода. Конкретизируя модель для данной ситуации, предполагаем, что такой переход возможен за счет «конденсации» в центре зоны Брюллюэна оптической моды V_{1u} , связанной с движением цепочечного кислорода O1 в направлении оси c . Переход происходит с образованием полярной фазы, при этом используем сведения о двухъямности потенциала, в котором находится кислород O1 в положении, смещенном перпендикулярно базальной плоскости на величину $\delta_z = \pm 0,4 \text{ \AA}$ [15]. В роли ЛНК (из уравнений (8)) в данном случае будет выступать смещение атомов O1. На основании измерений диэлектрической постоянной ультразвуковым методом и наблюдения при температурах 90 и 170 К аномалий в работе [16] сделан вывод о существовании в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\sigma}$ сегнетоэлектрических фа-

зовых переходов резонансного характера типа смещения. Кроме того, авторы работы [17], которые также наблюдали спонтанную поляризацию, сообщали о наличии пьезоэлектрического эффекта вдоль оси c .

Применим теперь описанную выше модель к монокристаллу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в виде пластины, ось c которого совпадает с z . Заменим локальные напряжения (7) на усредненные (5) и учтем влияние только одномерной деформации. При этом в качестве эффективной массы атома кислорода, участвующего в критическом колебании, примем $m = 400 \text{ \AA}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$, соответствующая компонента тензора упругих модулей c_{33} равна 150 ГПа [18], она связана с C_{3333} из (7): $c_{33} = C_{3333}/V_c$, где V_c — объем элементарной ячейки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, а затравочную частоту возьмем равной $\sqrt{A/m} = 336 \text{ см}^{-1}$ [19]. Тогда магнитное поле величиной 20 Тл при критическом токе $j_c = 5 \cdot 10^4 \text{ А/см}^2$ [20] и толщине пластины 0,001 м приводит к смещению нижней границы устойчивости высокотемпературной фазы, приходящейся на 50 К, примерно на 0,3 К в сторону увеличения температуры. Величина обсуждаемого эффекта относительно мала и зависит от многих факторов — геометрии образца, критического тока и т. д. В рассмотренной ситуации индуцированная пиннингом магнито-стрикция не является максимально возможной. Для пленочных образцов, у которых значения критического тока при азотных температурах на два порядка больше используемого в оценке, можно ожидать увеличения эффекта.

Воздействие магнитным полем на структурный фазовый переход, осуществляемое за счет индуцированной пиннингом магнито-стрикции, характеризуется наличием ряда особенностей. Так, результат будет зависеть от магнитной предыстории образца. Другой особенностью является то, что магнитный поток и, следовательно, напряжения распределены неоднородно. Исследование фазовых переходов при наличии такой неоднородности представляет собой отдельную проблему и может решаться, например, в рамках теории Ландау [21,22]. В [22] подобная задача моделировалась ситуацией с гелием, когда имелась вертикальная колонка жидкого ^4He в гравитационном поле Земли и необходимо было узнать T_λ в зависимости от высоты. Уравнение, аналогичное удовлетворяющему условию минимума свободной энергии в теории Ландау, можно получить исходя из используемой нами модели. Если упрощенно учесть связь ЛНК только с одномерной деформацией, соответствующей геометрии образца, в которой для определенности ось z совпадает с направлением

ем [001] решетки с периодом c вдоль того же направления, в принятой здесь общей модели, оставляя для этого в (8) только соответствующие параметры $G_{33} \equiv G$ и $C_{3333} \equiv C$ и вводя безразмерные величины, локальные из которых считаются зависимыми лишь от координаты z , а индекс, указывающий на положение в пространстве, опущен,

$$\langle U \rangle = \frac{G}{A} \langle u \rangle, \quad P = \frac{G^2}{CB}, \quad \Sigma = \frac{G_\sigma}{CA}, \quad (12)$$

$$\langle Q \rangle = \sqrt{B/A} \langle q \rangle, \quad Z = \sqrt{2A/c^2 \phi_0} z,$$

то, объединяя (8) и переходя к континуальному пределу (см. [12]), такое уравнение получим в виде:

$$\langle Q \rangle \left(\langle \delta Q^2 \rangle (3 - 2P) - 1 + 2\Sigma \right) + \langle Q \rangle^3 (1 - 2P) - \frac{d^2}{dZ^2} \langle Q \rangle = 0. \quad (13)$$

Это уравнение в отличие от уравнений теории Ландау не содержит введенных искусственным образом параметров, в том числе зависящих от температуры, в то же время в используемой модели остаются все недостатки, свойственные приближению среднего поля. Уравнение (13) не решается аналитически, и мы ограничимся только качественными рассуждениями. Так, при определенных условиях может возникать равновесная граница между обеими фазами в образце [21].

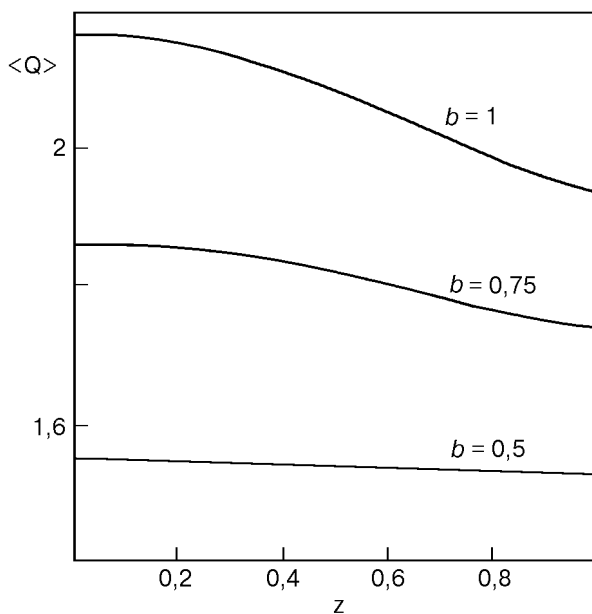


Рис. 1. Профили параметра порядка для различных значений поля b при фиксированной толщине пластины $2D = 2$.

Ввиду наличия границ (поверхностей пластины) допустима классификация условий на них для дифференциального уравнения (13) [23]. Примеры численного решения уравнения (13) и построения профилей представляемого в безразмерном виде параметра порядка $\langle Q \rangle$ структурного перехода, которые некоторым образом иллюстрируют общие рассуждения, касающиеся свойств (13), хотя не конкретизируют какой структурный переход происходит, были проведены упрощенно в классическом пределе [12] со следующими параметрами и граничными условиями:

$$P = 0,4, \quad \Omega_d = 2 \sqrt{\phi_0/A} = 500, \quad t = \frac{9BT}{\Omega_d^2 A^2} = 1, \quad (14)$$

$$\langle Q \rangle|_{z=0} = \langle \bar{Q} \rangle, \quad \frac{d}{dZ} \langle Q \rangle|_{z=0} = 0,$$

где $\langle \bar{Q} \rangle$ — значение параметра порядка, полученное при решении уравнения (13) с усредненными по объему напряжениями.

На рис. 1, 2 представлены результаты расчетов профилей параметра порядка $\langle Q \rangle$ структурного перехода в однодоменном образце, находящемся в низкотемпературной упорядоченной фазе, при различных значениях безразмерных величин, а именно: поля $b = B \sqrt{G/CA} \mu_0$ и полуширины пластины D , взятой в таком масштабе, что $D = j_c d \sqrt{G\mu_0/CA}$. Подобные зависимости для описанного выше структурного перехода в $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ могли бы означать «оптическую» деформацию, состоящую в смещении атомов це-

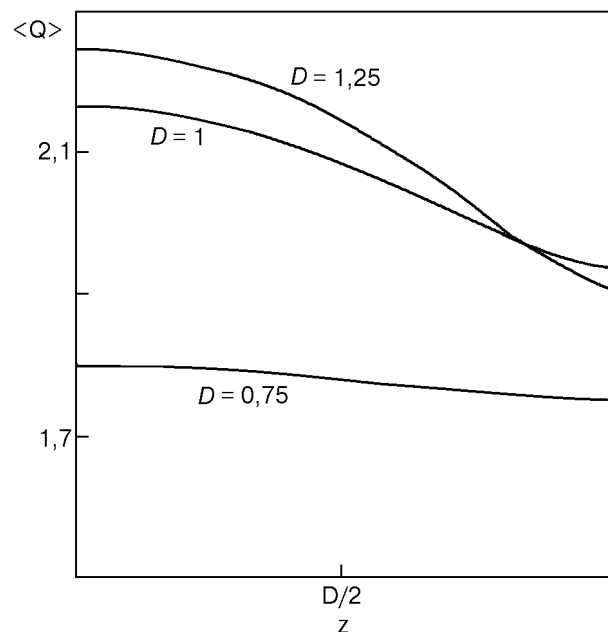


Рис. 2. Профили параметра порядка для различных значений толщины пластины D при фиксированном поле $b = 1$.

почечного кислорода вдоль оси c относительно остального ионного остова, и в любом случае дают соответствующий вклад в функцию рассеяния. Кроме того, вычисляемые в рамках теории упругости, например в [24], индуцированные пиннингом деформации вследствие наличия в системе внутреннего параметра (порядка) перестают быть линейно зависимыми от напряжений и должны определяться теперь из уравнений типа (8) и (13).

Таким образом, можно сделать вывод, что влияние индуцированных пиннингом напряжений на структурный низкотемпературный переход в ВТСП системе может быть заметным, по крайней мере в сравнении со значениями, характерными для магнитоэлектрического эффекта [8], и отличаться своеобразием.

1. N. M. Plakida, *Phys. Scripta* **29**, 8 (1989).
2. A. Jezowski, *Solid State Commun.* **71**, 419 (1989).
3. С. А. Гриднев, О. Н. Иванов, О. В. Дыбова, *СФХТ* **3**, 65 (1990).
4. G. Cannelli, M. Canali, R. Cantelli, F. Cordero, S. Ferraro, M. Ferreti, and F. Trequattrini, *Phys. Rev.* **B45**, 931 (1992).
5. А. А. Мамалуй, Л. С. Палатник, К. В. Беднов, М. А. Оболенский, А. В. Бондаренко, *ФНТ* **19**, 1180 (1993).
6. В. П. Дьяконов, И. М. Фита, Н. А. Дорошенко, М. Баран, Г. Шичмак, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 784 (1996).
7. М. А. Кривоглаз, В. Д. Садовский, *ФММ* **18**, 502 (1964).
8. D. Wagner and D. Bauerle, *Phys. Lett.* **83A**, 347 (1981).
9. A. Gordon, I. D. Vagner, and P. Wyder, *Physica* **C235-240**, 1575 (1994).
10. H. Ikuta, N. Hirota, Y. Nakayama, K. Kishio, and K. Kitazawa, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2166 (1993).
11. L. Z. Lubyany, A. A. Mamalui, and I. N. Sablin, *Functional materials* **7**, 447 (2000).
12. В. Л. Аксенов, Н. М. Плакида, С. Стаменкович, *Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками*, Энергоатомиздат, Москва (1984).

13. А. П. Сайко, В. Е. Гусаков, В. С. Кузьмин, *Письма в ЖЭТФ* **56**, 425 (1992).
14. E. Pytte, *Phys. Rev.* **B5**, 3758 (1972).
15. C. Greaves and P. R. Slater, *Solid State Commun.* **74**, 591 (1990).
16. V. Müller, C. Hucho, K. de Groot, D. Winau, D. Mauer, and K. H. Rieder, *Solid State Commun.* **72**, 997 (1989).
17. D. Mihailovic and A. J. Heeger, *Solid State Commun.* **75**, 319 (1990).
18. E. Zouboulis, Sudha Kumar, U. Welp, G. H. Chen, S. K. Chan, M. Grimsditch, J. Downey, and L. McNeil, *Physica* **C190**, 329 (1992).
19. Ю. Э. Китаев, М. Ф. Лимонов, А. П. Миргородский, А. Г. Панфилов, Р. А. Эваристов, *ФТТ* **36**, 865 (1994).
20. *Физические свойства ВТСП (2)*, А. И. Буздин, В. В. Мошалоков (ред.), Гиперокс, Москва (1991).
21. N. Giordano, P. Muzikar, and S. S. C. Burnett, *Phys. Rev.* **B36**, 667 (1987).
22. В. А. Слюсарев, М. А. Стржемечный, *ЖЭТФ* **58**, 1757 (1970).
23. R. Lipowsky and W. Speth, *Phys. Rev.* **B28**, 3983 (1983).
24. T. M. Johansen, *Phys. Rev.* **B60**, 9690 (1999).

The influence of a magnetic field on structural transition in HTSC

A. A. Mamalui and I. N. Sablin

The effect of the magnetic flux pinning induced stress on structural phase transitions in HTSC-systems is considered theoretically. The model of a particular concrete structural transition in $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ which allows one to describe the experimentally observed anomalies of various physical properties with a hysteretic behavior in the range 50–200 K is used. The effect associated with the magnetostriction existence and consisting in changing the boundary positions of the hysteresis region is estimated.