



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-87-498

Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов, Ш.Л.Дрекслер

**АНГАРМОНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ**

Направлено в Оргкомитет IV Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики, Дубна;
Оргкомитет Рабочей встречи по советско-финскому проекту "Сфинкс", Гатчина,
20-26 сентября 1987 г.

1987

1. ВВЕДЕНИЕ

В недавних экспериментах были получены рекордные значения для температуры сверхпроводящего перехода $T_c = 30 \div 40$ К в соединениях $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_4$ ^{/1-3/} и $T_c = 90 \div 95$ К в соединениях $MBa_2Cu_3O_7$ ($M = Y, Eu, La, \dots$)^{/4-6/}, подтвержденные во многих лабораториях мира (дополнительные ссылки см. в цитированных работах). Микроскопический механизм возникновения столь высоких T_c остается, однако, еще не выясненным.

Квазидвумерный характер электронного спектра как в структуре La_2CuO_4 ^{/7,8/}, так и в структуре $YBa_2Cu_3O_7$ ^{/9/}, а также сильная электрон-фононная связь в $Cu-O$ играют наиболее важную роль в объяснении высоких T_c . Так, в работе^{/10/} было показано, что обычный фононный механизм при учете сильной перенормировки колебательной моды октаэдра CuO_6 на границе зоны Бриллюэна (так называемая "дыхательная" мода) может приводить к $T_c \approx 40$ К для системы $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_4$. В то же время структурные исследования^{/11-15/} обнаруживают структурную неустойчивость этих соединений, наличие мягких мод, которые проявляются в аномально больших и анизотропных тепловых факторах ионов кислорода^{/11, 15/}. При этом наблюдается корреляция максимальной температуры T_c с обращением в ноль температуры структурного перехода T_d в $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_4$ ^{/13/}. Подобная взаимосвязь высокой T_c с существованием мягких мод и структурной неустойчивости уже отмечалась для родственных соединений $Va(Pb, Bi)O_3$ со структурой перовскита (см. ^{/16, 17/} и цитированную там литературу). В связи с этим необходимо детально исследовать возможную связь высокой T_c в новых соединениях с перовскитоподобной структурой с наличием в них явлений сильного ангармонизма (мягких мод, структурных переходов).

Для объяснения значительного усиления T_c в структурно-неустойчивых системах в работах^{/18/} была предложена ангармоническая модель высокотемпературного сверхпроводника. В этой модели предполагается, что в системе имеются сильно ангармонические колебания в двухъям-

ном потенциале с большой амплитудой $d \gg \sqrt{\langle u^2 \rangle}$, где $\langle u^2 \rangle$ — среднеквадратичные смещения ионов в гармоническом потенциале. Поскольку эффективная электрон-электронная константа связи λ пропорциональна среднему квадрату смещений ионов, то ангармоническая константа связи λ_s оказывается в этом случае много больше константы связи λ_{ph} в гармоническом приближении $\lambda_s/\lambda_{ph} \sim d^2/\langle u^2 \rangle \gg 1$. Эта модель была

использована в ^{19/} для оценки увеличения T_c в металлических стеклах за счет двухуровневых систем и в работе ^{20/} для объяснения обратного изотопического эффекта в гидридах Zr, Hf — (H, D). Отметим также работу ^{21/}, где была предсказана $T_c \approx 100$ K для ангармонической модели при достаточно высокой концентрации двухуровневых систем. Отметим, что развитая в ^{18/} ангармоническая модель сверхпроводника является прямым обобщением известной электрон-фононной модели, рассмотренной в работах ^{22/}, на случай сильно ангармонических колебаний решетки.

В настоящей работе высокотемпературная сверхпроводимость в оксидных материалах с перовскитной структурой исследуется на основе ангармонической модели ^{18/}. В разд. 2 вводится псевдоспиновая модель для мягкой моды, связанной с вращением комплексов CuO_n . В разд. 3 получены уравнения сверхпроводимости в псевдоспиновой модели. В разд. 4 дается оценка параметров модели и находится T_c для структур $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Обсуждение результатов приведено в разд. 5. Предварительные результаты этой работы были сообщены в ^{23/}.

2. ПСЕВДОСПИНОВАЯ МОДЕЛЬ

Известно большое число структурных фазовых переходов (СФП) в перовскитоподобных соединениях $(\text{AX})_n\text{ABX}_3$, обусловленных мягкими ротационными модами на границе зоны Бриллюэна. Эти моды представляют собой вращение достаточно жестких октаэдров BX_6 в ячейке, образованной катионами сорта А. Предвестниками таких СФП являются аномально большие и сильно анизотропные тепловые факторы, обычно наблюдаемые с помощью дифракции нейтронов (см., например, ^{24/}).

Система $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ испытывает СФП из высокотемпературной тетрагональной фазы (пр. группа D_{4h}^{17}) в ромбическую (пр. группа D_{2h}^{18}) при температуре T_d , которая почти линейно уменьшается с концентрацией x от $T_d(x=0) \approx 530$ K до $T_d \approx 0$ при $x=0,2$ ^{13/}. При этом наблюдаются аномально большие тепловые факторы для ионов кислорода, $V_0 = 2\pi^2 \langle u^2 \rangle \approx 1,5 \text{ \AA}^2$, анизотропия которых указывает на большую амплитуду колебаний, связанных с вращением октаэдров вдоль осей $[110]$ или $[\bar{1}10]$ (см. ^{11,12/}). Симметричный анализ показывает ^{25/}, что СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$ происходит с удвоением примитивной ячейки и определяется двухкомпонентным параметром порядка (C_1, C_2) , который связан с одномерным неприводимым представлением на двухлучевой звезде (\vec{q}_1, \vec{q}_2) волнового вектора в точке X зоны Бриллюэна. Физической реализацией параметра порядка является вращение октаэдра CuO_6 вокруг оси $[1,1,0]$ для луча $\vec{q}_1 = (\pi/a) (1,1,0)$ или вращение вокруг оси $[\bar{1},1,0]$ для луча $\vec{q}_2 = (\pi/2) (-1,1,0)$ соответственно ^{25/}.

Для системы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ также наблюдаются аномально большие и сильно анизотропные тепловые факторы для ионов кислорода ^{15/}. Наибольшее значение имеет $V_{zz} \approx 3 \div 4 \text{ \AA}^2$ для смещений ионов кислорода перпендикулярно одномерным цепочкам Cu-O (см. ^{15/}). Следовательно, и в системе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ имеются мягкие ротационные моды, связанные с вращением групп CuO_5 или CuO_4 в достаточно жестком каркасе, образованном остальными ионами. При этом так называемая "дыхательная мода", связанная с полносимметричными колебаниями кислорода вдоль связи Cu-O , имеет гармонический характер с достаточно высокой средней частотой $\omega \approx 600$ K (см., например, ^{27/}).

Учитывая приведенные экспериментальные данные, для описания динамики ионов кислорода в мягкой ротационной моде можно воспользоваться модельным гамильтонианом общего вида ^{26/}:

$$H = \sum_{\ell k} \frac{m}{2} \dot{X}^2(\ell, k) + \frac{1}{2} \sum_{\ell \ell'} \sum_{kk'} \Phi_{kk'}(\ell, \ell') X(\ell, k) X(\ell', k') + \frac{1}{4} V \sum_{\ell k} X^4(\ell, k). \quad (1)$$

Здесь $X(\ell, k)$ — компонента смещений ионов кислорода сорта k в ℓ -й примитивной ячейке, связанной с вращением группы CuO_n ($n=4,5,6$), т.е. смещение происходит перпендикулярно связи Cu-O . Гармоническая силовая постоянная $\Phi_{kk'}(\ell, \ell')$ определяет взаимодействие таких смещений в соседних ячейках ($\ell \neq \ell'$) и эффективный одночастичный потенциал (при $k=k', \ell=\ell'$) в виде двойной ямы, определяющей неустойчивую в гармоническом приближении ротационную моду. Ангармоническое локальное взаимодействие смещений ионов кислорода с остальными ионами определяется модельным параметром V . Вводя локальные нормальные моды колебаний, которые описывает вращение групп CuO_n , и переходя к псевдоспиновому представлению, в котором учитываются лишь два низших уровня возбуждений в ангармоническом потенциале в (1), можно получить эффективный модельный гамильтониан в виде

$$H = -\Omega \sum_{\ell} S_{\ell}^z - \frac{1}{2} \sum_{\ell \neq m} C_{\ell m} S_{\ell}^x S_m^x, \quad (2)$$

где $\Omega = E_a - E_b > 0$ — разность энергий между двумя низшими состояниями в ангармоническом локальном потенциале в виде двойной ямы: антисимметричным (Ψ_a) и симметричным (Ψ_b) состояниями. $C_{\ell m}$ — эффективная константа связи для разных ячеек, фурье-компонента которой $C(\vec{q})$ определяет дисперсию мягкой моды. Псевдоспиновый оператор S_{ℓ}^a ($S=1/2$) действует в пространстве двух состояний (Ψ_b, Ψ_a).

Для простоты в (2) не учитывается существование нескольких ветвей мягких колебаний в исходной модели (1). Например, в тетрагональной фазе La_2CuO_4 следует рассматривать двухкратно вырожденную в точке X мягкую ротационную моду (см. ^{26/}), а в системе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ имеется несколько мягких ротационных мод (связанных,

соответственно, с 3 группами CuO_n в примитивной орторомбической ячейке, пр. группа D_{2h}^1 ($15'$). Наличие нескольких мягких мод можно учесть в (2), введя операторы S_{λ}^q и соответствующие параметры Ω_{λ} , C_{λ}^q , где λ — номер ветви. Для дальнейших оценок мы будем пренебрегать этими усложнениями.

Как показывают расчеты электронной зонной структуры в высокотемпературных сверхпроводниках $^{7-9/}$, наиболее сильное электрон-фононное взаимодействие возникает для колебаний, изменяющих длину связи Cu-O (деформационный потенциал $J \approx 2 \div 3 \text{ эВ/Å}^{7,10/}$). Однако высокая частота колебаний для этой моды (без специального учета ее перенормировки на границе зоны — см. $^{10/}$) приводит к малой величине константы связи λ_{ph} . В то же время малая величина электрон-фононного взаимодействия для ротационной моды $^{7,10/}$ в случае мягкой моды может быть компенсирована большой амплитудой колебаний ионов для этой моды, что дает достаточно большую величину константы λ_s . В связи с этим в дальнейшем для оценок мы рассматриваем взаимодействие электронов на поверхности Ферми только с мягкими ротационными модами в модели (2). Чтобы оценить это взаимодействие, необходимо учесть появление дополнительной гибридизации Cu-d (x^2-y^2) и $0-p_z$ орбиталей при смещении ионов кислорода перпендикулярно связи Cu-O . При этом интеграл перекрытия $t \sim J \cdot X(\ell, k)$, где $X(\ell, k)$ — смещение иона O (см. (1)). В псевдоспиновом представлении, принятом в (2), соответствующее электрон-фононное взаимодействие можно при этом записать в виде

$$H_{e-s} = \sum_{\vec{p}\vec{p}', q\sigma} V_q(\vec{p}, \vec{p}') S_q^x a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}'\sigma}, \quad (3)$$

где

$$V_q(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell} e^{i\vec{q}\ell} \langle p | \frac{\partial}{\partial X} U(\vec{\ell} + \vec{X} + \vec{r}) | p' \rangle 2x_{sa} \approx \approx \frac{1}{\sqrt{N}} 2x_{sa} J_q \delta_{\vec{p}-\vec{p}', \vec{q}}. \quad (4)$$

Здесь $x_{sa} = \langle \Psi_s | X | \Psi_a \rangle$ и J_q — деформационный потенциал. Оценка его приводится в п.4. Таким образом, мы приходим к псевдоспиновой ангармонической модели для высокотемпературных сверхпроводников в виде

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + H_s + H_{e-s}, \quad (5)$$

где ϵ_p — электронный спектр вблизи поверхности Ферми, а H_s и H_{e-s} определены в (2) и (3) соответственно. Прямое кулоновское взаимо-

действие для электронов в (5) опущено — учет его можно провести стандартными методами (см. $^{28/}$).

3. УРАВНЕНИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Для вывода уравнений сверхпроводимости для модели (5) необходимо получить выражение для матричной функции Грина электронов

$$G_p(t-t') = \langle\langle \psi_p(t); \psi_p^+(t') \rangle\rangle, \quad (6)$$

где введены операторы Намбу

$$\psi_p = \begin{pmatrix} a_{p\uparrow} \\ a_{-p\downarrow}^+ \end{pmatrix}, \quad \psi_p^+ = (a_{p\uparrow}^+ \ a_{-p\downarrow}) \quad (7)$$

и использованы обычные обозначения для запаздывающей двухвременной функции Грина $^{29/}$. Дифференцируя (6) по t , а затем по t' , как это описано в $^{28/}$ (см. также $^{18/}$), приходим к уравнению Дайсона для фурье-компоненты (6):

$$G_p(\omega)^{-1} = G_p^0(\omega)^{-1} - \Sigma_p(\omega), \quad (8)$$

где

$$G_p^0(\omega)^{-1} = (\omega \tau_0 - \epsilon_p \tau_3) \quad (9)$$

и массовый оператор

$$\Sigma_p(\omega) = \sum_q |V_q(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \tau_3 \langle\langle S_q^x \psi_{\vec{p}'} | S_{-q}^x \psi_{\vec{p}}^+ \rangle\rangle \omega \tau_3. \quad (10)$$

Здесь $\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Пренебрегая перенормировкой вершины, для массового оператора получаем приближенное выражение (см. $^{28, 18/}$):

$$\Sigma_p(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \left(\text{th} \frac{\beta\omega_1}{2} + \text{cth} \frac{\beta\omega_2}{2} \right), \quad (11)$$

$$\sum_q |V_q(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \text{Im} \langle\langle S_q^x | S_{-q}^x \rangle\rangle \omega_2 + i\delta \tau_3 \text{Im} G_{p'}(\omega_1 + i\delta) \tau_3.$$

Дальнейший анализ уравнений сверхпроводимости в приближении сильной связи проводится стандартными методами. Для оценки температуры

сверхпроводящего перехода необходимо вычислить константу связи ^{/18/}:

$$\lambda_s = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{\omega} \alpha_s^2(\omega) F_s(\omega) =$$

$$= - \frac{1}{N(0)} \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} |V_q(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \ll S_{\vec{q}}^x | S_{-\vec{q}}^x \gg_{\omega=0} \approx N(0) \overline{J_s^2} \chi_s. \quad (12)$$

Здесь $N(0)$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми S_F , $\overline{J_s^2} \approx J^2$ — усредненный деформационный потенциал в (4). Усредненное значение статической восприимчивости для мягкой моды в модели (2) описывается выражением

$$\chi_s = - \frac{(2x_{sa})^2}{N} \sum_{\vec{q}} \ll S_{\vec{q}}^x | S_{-\vec{q}}^x \gg_{\omega=0} = \frac{(2x_{sa})^2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\Omega \langle S^z \rangle}{E_q^2}, \quad (13)$$

где

$$\langle S^z \rangle = (\Omega/2h) \text{th}(\beta h/2), \quad h^2 = \Omega^2 + (C(0) \langle S^x \rangle)^2$$

и спектр возбуждений в приближении случайных фаз для модели (2):

$$E_q^2 = h^2 + \Omega C(q) \langle S^z \rangle. \quad (14)$$

Здесь $C(q)$ — фурье-компонента взаимодействия C_{lm} в (2). Выше температуры структурного перехода $T > T_d$, когда $\langle S^x \rangle = 0$, имеем $h^2 = \Omega^2$, и оценка (13) принимает вид

$$\chi_s = \frac{2x_{sa}^2}{\omega_s^2} \Omega \text{th} \frac{\beta \Omega}{2}, \quad \frac{\Omega^2}{\omega_s^2} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left(1 + \frac{C(q)}{\Omega} \langle S^z \rangle\right)^{-1}. \quad (15)$$

Ввиду сильной анизотропии мягкой ротационной моды (слабой связи при повороте октаэдров в соседних плоскостях вдоль оси вращения ^{/26/}) можно считать, что $\omega_s \approx \Omega$ в (15). Для сравнения λ_s (12) с λ_{ph} для гармонических фононов запишем последнюю константу в том же виде, что и (12), (13):

$$\lambda_{ph} = N(0) \overline{J_{ph}^2} \chi_{ph}, \quad (16)$$

где статическая восприимчивость для гармонических фононов

$$\chi_{ph} = \frac{1}{M \bar{\omega}^2} = \frac{2 \langle u^2 \rangle}{h \bar{\omega}} \text{th} \frac{\beta h \bar{\omega}}{2}. \quad (17)$$

Здесь введено среднеквадратичное смещение ионов

$$\langle u^2 \rangle = (\hbar/2M\bar{\omega}) \text{cth}(\beta \hbar \bar{\omega}/2), \quad \bar{\omega} = \sqrt{\overline{\omega^2}}.$$

в гармоническом приближении со средней частотой $\bar{\omega}$. Отношение констант (12) и (16) может быть представлено в виде

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_{ph}} = \frac{\overline{J_s^2} x_{sa}^2}{\overline{J_{ph}^2} \langle u^2 \rangle} \cdot \frac{\hbar \bar{\omega}}{\Omega} \gg 1, \quad (18)$$

где сильное неравенство обусловлено тем, что $x_{sa}^2 > \langle u^2 \rangle$ и $\hbar \bar{\omega} > \Omega$. Например, для La_2CuO_4 можно принять $x_{sa} \approx 0,2 \text{ \AA}$ (статическое смещение при $T < T_d$ ^{/11/}) и $\sqrt{\langle u^2 \rangle} \approx 0,06 \text{ \AA}$ ^{/27/} для гармонических колебаний вдоль связи Cu—O.

4. ОЦЕНКА ТЕМПЕРАТУРЫ ПЕРЕХОДА

При вычислении T_c можно воспользоваться общей формулой в виде

$$T_c = \omega_s f(\lambda, \mu^*), \quad (19)$$

где ω_s — средняя частота мягкой ротационной моды, а $f(\lambda, \mu^*)$ описывает зависимость T_c от константы связи λ и кулоновского псевдопотенциала μ^* . В случае $\lambda \leq 1$ можно воспользоваться известной формулой Мак-Миллана, а при $\lambda > 1$ для промежуточной связи — формулой ^{/30/}:

$$f(\lambda) \approx 0,05(\lambda - 0,25), \quad (19a)$$

или при $\lambda \gg 1$ — формулой ^{/31/}:

$$f(\lambda) \approx 0,18 \sqrt{\lambda}. \quad (19b)$$

Для дальнейших оценок согласно (19) вкладом кулоновского потенциала μ^* , а также вкладом гармонических фононов λ_{ph} будем пренебрегать, полагая $\lambda_{ph} - \mu^* \ll 1$.

Чтобы вычислить λ_s (12), необходимо определить параметры $N(0)$, J и χ_s (15). Согласно результатам вычисления электронной структуры для $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ системы $N(0) \approx 1,3$ (сост./эВ атом Cu) ^{/7/},

а для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ $N(0) \approx 3$ (сост./эВ атом Cu)^{9/}. Для оценки деформационного потенциала J_s учтем, что при СФП в орторомбической фазе La_2CuO_4 открывается диэлектрическая щель $E_g = 0,1 \div 0,2$ эВ при смещениях ионов кислорода $\langle X(\ell, k) \rangle \approx x_{sa} \approx 0,2 \text{ \AA}$ в мягкой ротационной моде. Полагая $E_g \approx J_s x_{sa}$, находим $J_s \approx 0,5 \div 1$ (эВ/Å). Для средней частоты мягкой моды примем $\hbar\omega_s = 20$ мэВ. Согласно^{32/} в $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ именно эта группа частот имеет аномальное температурное поведение. Следовательно, для этих оценок находим

$$\chi_s = \frac{2x_{sa}^2}{\hbar\omega_s} \approx 4 \frac{\text{Å}^2}{\text{эВ}} \quad (20)$$

и для эффективной константы связи (12)

$$\lambda_s \approx 1,3 \div 5 (\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4), \quad \lambda_s \approx 3 \div 12 (\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7). \quad (21)$$

Согласно формуле (19а) (или 19б) получаем

$$T_c \approx 10 \div 60 \text{ K} (45 \div 90 \text{ K}) \text{ для } \text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4, \quad (22)$$

$$T_c \approx 30 \div 130 \text{ K} (70 \div 140 \text{ K}) \text{ для } \text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7.$$

Приведенные оценки для T_c близки к экспериментально наблюдаемым температурам перехода^{1-6/}.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе для объяснения высоких температур сверхпроводящего перехода T_c в недавно открытых оксидных сверхпроводниках^{1-6/} нами была использована ангармоническая модель^{18/}, сформулированная ранее для объяснения наблюдаемой в ряде экспериментов корреляции между повышением T_c и структурной неустойчивостью системы. В основе этой модели лежит предположение о существовании сильно ангармонических колебаний в локальном двухъямном потенциале. Подобные сильно ангармонические колебания являются характерной особенностью перовскитной структуры^{24/}, которую имеют оксидные сверхпроводники. В этом случае большая величина константы связи λ_s (и высокие T_c) достигаются не за счет сильной электрон-фононной связи, а за счет высокой восприимчивости решетки χ_s (ее высокой поляризуемости), которая обусловлена малой величиной эффективной силовой постоянной. Действительно, согласно оценке (20) имеем $f_{ph}^{-1} \approx \chi_s^{-1} \approx 0,25$ (эВ/Å²), что много меньше характерной гармонической постоянной для "дыхательной" моды $f_{ph} \approx 7 \div 11$ (эВ/Å²)^{10/}.

Поэтому даже при слабой связи: $\eta_s = N(0) \overline{J_s^2} \approx 0,3 \div 1,3$ (эВ/Å²) для $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ и $\eta_s \approx 0,75 \div 3$ (эВ/Å²) для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ получаем согласно (12) достаточно большие λ_s (21). Подобная же оценка для родственного соединения $\text{Ba}(\text{Pb}, \text{Bi})\text{O}_3$, имеющего еще более низкое значение $N(0) \approx 0,5$ (сост./эВ атом)^{16, 7/} приводит к $\lambda_s \approx 0,5 \div 2$ и $T_c \approx 10 \div 15 \text{ K}$ в соответствии с экспериментом.

Характерной особенностью мягких ротационных мод в перовскитах является их сильная анизотропия: слабая связь между поворотами октаэдров, расположенных вдоль оси вращения, приводит к малой величине дисперсии в этом направлении и большому вкладу в константу λ_s (12) при усреднении по фазовому пространству в (13). Экспериментально это наблюдается в сильной анизотропии тепловых факторов — их большой величине вдоль характерных направлений смещений ионов (ср. с^{24/}).

Микроскопической причиной появления мягких ротационных мод в перовскитах ABX_3 является неустойчивость центрального положения аниона X в плоскости грани, образованной катионами A, которое и определяет локальный потенциал с двумя (в общем случае — несколькими) минимумами. При достаточной глубине этих минимумов (большие энергии нулевых колебаний) и достаточно сильной связи возникает структурный переход с понижением симметрии, как в La_2CuO_4 . Можно предположить, что введение примесей Ba^{2+} или Sr^{2+} вместо La^{3+} эффективно уменьшает эту неустойчивость (глубина минимумов уменьшается), что приводит к понижению температуры структурного перехода T_d и при высоких концентрациях, $x \geq 0,4$, исчезновению мягких мод и резкому падению T_c (см. ^{26/}). Возникающий при этом пайерлсовский переход в La_2CuO_4 , как показывают структурные исследования^{11-12/}, может быть связан только с ротационной модой, в связи с чем носит необычный характер поперечной волны зарядовой плотности. Возникающее при этом понижении энергии электронной подсистемы мало ввиду слабой связи электронов с поперечным смещением ионов кислорода, и поэтому пайерлсовский переход не является определяющим в этом структурном переходе. Подобная ситуация, по-видимому, наблюдается и в сверхпроводящей фазе $\text{Ba}(\text{Pb}, \text{Bi})\text{O}_3$ ^{16/}.

Характерной особенностью фононного механизма в случае гармонических фононов является наличие изотопического эффекта, особенно если во взаимодействии участвуют лишь колебания атомов одного сорта: $T_c \sim (1/M)^{1/2}$. В ангармонической модели эффективная константа связи (12) существенно зависит от частоты ангармонических фононов (см. (15)) и поэтому изотопический эффект носит более сложный характер: в области $\lambda < 1 \div 2$ возможен обратный изотопический эффект (см. ^{12/}), а при $\lambda > 10$ получаем $T_c \sim M^{-1/4}$ ^{33/}. Поэтому отсутствие изотопического эффекта при замене O^{16} на O^{18} в оксидных сверхпроводниках^{34/} не противоречит развитой модели. Дополнительная маскировка изотопического эффекта возникает также при учете вклада фононов, связанных с колебанием других атомов системы, и вклада μ^* ^{22, 34/}.

В целом предложенное в настоящей работе объяснение высокой T_c в новом классе оксидных сверхпроводников $Va(Pb, Bi)O_3$, $La_{2-x}(Ba, Sr)_xCuO_4$, $YBa_2Cu_3O_7$ на основе ангармонической модели^{/18/} при учете взаимодействия электронов с сильно ангармоническими ротационными колебаниями, характерными для перовскитов, представляется физически разумным. Дальнейшие исследования фононного спектра купритов лантана, иттрия-бария и аналогичных им соединений позвоят провести более детальные количественные расчеты T_c .

Авторы благодарят академика Н.Н.Боголюбова за плодотворные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bednorz J.G., Muller K.M. – *Z.Phys.B*, 1986, 64, p.189.
- Bednorz J.D., Takashige M., Muller K.A. – *Europhys. Lett.*, 1987, 3, p.379.
2. Chu C.W. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.405.
3. Cava R.J. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.408.
4. Wu M.K. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.908.
5. Murphy D.W. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1888.
6. Hor P.H. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1891.
7. Mattheiss L.F. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1028.
8. Jaejun Yu., Freeman A.F., Xu J.-H. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1035;
- Xu J.-H., Watson-Yang T.J., Freeman A.J. – *Phys.Lett.*, 1987, 120; p.489.
9. Mattheiss L.F., Hamann D.R. – *Solid.St.Comm.* 1987.
10. Weber W. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1371.
11. Jorgensen J.D. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1024.
12. Cava R.J. et al. – *Phys.Rev.*, 1987, B35, p.6716.
13. Fleming R.M. et al. – *Phys.Rev.*, 1987, B35, p.7191.
14. McK Paul D., et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.1976.
15. Caponi J.J. et al. – *Europhys. Lett.*, 1987, 4;
- Hewat A.W. et al. – *Nature*, 1987, 327.
16. Mattheis L.F., Hamann D.R. – *Phys.Rev.*, 1983, B28, p.4227.
17. Reichardt W., Batlogg B., Remeika J.P. – *Physica*, 1985, 135B, p.501.
18. Vujčić G.M., Aksenov V.L., Plakida N.M., Stamenković S. – *Phys.Lett.*, 1979, 73A, p. 439; – *J.Phys.C: Solid St.Phys.*, 1981, 14, p.2377.
19. Вуйичич Г.М., Плакида Н.М. – *ФНТ*, 1983, 9, p.269;
- Drechsler S.L., Vujčić G.M. – *phys.stat.sol. (b)*, 1983, 117, p.569.
20. Drechsler S.L., Vujčić G.M., Plakida N.M. – *J.Phys.F.: Met.Phys.*, 1984, 14, p.L243.
21. Vujčić G.M. – *phys.stat.sol. (b)*, 1984, 123, p.K93.
22. Bogolubov N.N. – *Nuovo Cim.*, 1958, 7, p.794;
- Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. – *A New Method in the Theory of Superconductivity*. New York, Consultants Bureau, London, Chapman and Hall, 1959, VII, 121 p.
23. Plakida N.M., Aksenov V.L., Drechsler S.L. *JINR E17-87-198, Dubna, 1987.*
24. Hutton J. Nemes R.J. – *J.Phys. C: Solid. St. Phys.*, 1981, 14, p.1713.
25. Плакида Н.М., Шахматов В.С. *ОИЯИ P17-87-488, Дубна, 1987.*
26. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Влах С. *ОИЯИ P17-87-444, Дубна, 1987.*
27. Tranquada J.M. et al. – *Phys.Rev.*, 1987, B35, p.7187.
28. Вуйичич Г.М., Петру З.П., Плакида Н.М. – *ТМФ*, 1981, 46, с.91.
29. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. – *ДАН СССР*, 1959, 126, с.53;
- Зубарев Д.Н. – *УФН*, 1960, 71, с.71.
30. Rowell J.M. – *Solid. St.Comm.*, 1976, 19, p.1131.
31. Allen P.B., Dynes R.C. – *Phys.Rev.*, 1975, B12, p.905.
32. Balakrishnan G. et al. – *Nature*, 1987, 327, p.45.
33. Plakida N.M., Drechsler S.L. *JINR E17-87-245, Dubna, 1987.*
34. Batlogg B. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.2333.
35. Bourne L.C. et al. – *Phys.Rev.Lett.*, 1987, 58, p.2337.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 июля 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

| | | |
|----------------|---|-----------------------------|
| Д3,4-82-704 | Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982. | 5 р.00 к. |
| Д7-83-644 | Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983. | 6 р.55 к. |
| Д2,13-83-689 | Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983. | 2 р.00 к. |
| Д13-84-63 | Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983. | 4 р.50 к. |
| Д2-84-366 | Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984. | 4 р.30 к. |
| Д1,2-84-599 | Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984. | 5 р.50 к. |
| Д10,11-84-818 | Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983. | 3 р.50 к. |
| Д17-84-850 | Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/ | 7 р.75 к. |
| Д11-85-791 | Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985. | 4 р.00 к. |
| Д13-85-793 | Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985. | 4 р.80 к. |
| Д4-85-851 | Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985. | 3 р.75 к. |
| Д3,4,17-86-747 | Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986. Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/ | 4 р.50 к. 13 р.50 к. |
| Д1,2-86-668 | Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/ | 7 р.35 к. |

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Плакида Н.М., Аксенов В.Л., Дрекслер Ш.Л.
Ангармоническая модель
высокотемпературных сверхпроводников

P17-87-498

Значительное увеличение температуры сверхпроводящего перехода T_c в перовскитных оксидных соединениях объясняется на основе ангармонической модели сверхпроводника со структурно неустойчивой решеткой. Показано, что взаимодействие электронов с сильно ангармоническими колебаниями ионов кислорода ротационного типа приводит к большой константе связи λ . Полученные для T_c оценки находятся в соответствии с экспериментальными данными для систем $\text{La}(\text{Y})\text{BaCuO}$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Plakida N.M., Aksenov V.L., Drechsler S.L.
Anharmonic Model for High- T_c Superconductors

P17-87-498

A considerable enhancement of the superconducting transition temperature T_c in perovskite-type oxides is explained in the framework of the anharmonic model for superconductors with structurally unstable lattices. It is shown that interaction of electrons with highly anharmonic oxygen-ion vibrations of a rotational type results in a sufficiently large coupling constant λ . The obtained estimation for T_c is in agreement with experimental data for $\text{La}(\text{Y})\text{BaCuO}$ systems.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987