

# СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ИТТРИЯ, БАРИЯ И ЯДРА YBa В СОЕДИНЕНИИ YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> В МОДЕЛИ ИЗИНГА

*М. Кескин<sup>\*</sup>, Н. Шарлы*

*Department of Physics, Erciyes University  
38039, Kayseri, Turkey*

Поступила в редакцию 2 марта 2018 г.

(Перевод с английского)

## SUPERCONDUCTING PHASE DIAGRAM OF THE YTTRIUM, BARIUM, AND YBa-CORE IN YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> BY AN ISING MODEL

M. Keskin, N. Şarli

Исследованы температурная зависимость намагниченности, гистерезисные свойства и фазовые диаграммы сверхпроводника YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> (YBCO) в модели Изинга в рамках теории эффективного поля. Получены величины магнитных моментов YBCO и его элементов (Cu1, Cu2, O1, O2, O3, O4, Ba, Y, оболочки CuO, ядра YBa и соединения в целом) в зависимости от приведенной температуры и внешнего магнитного поля. Обнаружено, что атомы меди имеют два различных магнитных момента (Cu1 и Cu2), атомы кислорода — четыре (O1, O2, O3, O4), однако иттрий и барий имеют одно значение магнитного момента. Различия магнитных моментов меди и кислорода обусловлены их положением в решетке. Магнитный момент атомов Cu1 является наименьшим, а иттрия — наибольшим из всех. Следовательно, магнитные моменты элементов YBCO возрастают от угла орторомбической решетки к ее центру. Также обнаружено, что ядро YBa и атомы иттрия и бария проявляют сверхпроводящие свойства, а их фазовые диаграммы включают нормальное, вихревое и мейснеровское состояния. Также получено, что верхнее критическое коэрцитивное поле  $H_{c2}$  и критическая температура  $T_v$  вихревого состояния бария выше, чем у иттрия и ядра YBa.

DOI: 10.1134/S0044451018090158

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В современных исследованиях сверхпроводимость подразделяют по величине критической температуры на две области, низкотемпературную и высокотемпературную (ВТСП). Низкотемпературная сверхпроводимость была открыта в 1911 г. Камерлинг-Оннесом [1], который наблюдал резкое уменьшение электрического сопротивления до нуля при температуре 4.2 К и приписал этот эффект появлению новой сверхпроводящей фазы. После этого открытия было обнаружено, что многие материалы и сплавы проявляют сверхпроводящие свойства. В

1933 г. был открыт эффект вытеснения внешнего магнитного поля из внутреннего объема вещества в процессе его перехода в сверхпроводящее состояние, т. е. потери сопротивления при протекании электрического тока при охлаждении ниже определенной температуры (эффект Мейснера) [2]. В дальнейшем макроскопические и микроскопические свойства низкотемпературных сверхпроводников I и II рода были успешно объяснены в рамках нескольких теоретических подходов, таких как теория Лондонов [3], теория Гинзбурга–Ландау [4–7], теория вихрей Абрикосова [8] и теория Бардина–Купера–Шриффера [9]. В 1986 г. в керамических сверхпроводниках нового типа La–Ba–Cu–O была открыта высокотемпературная сверхпроводимость

<sup>\*</sup> E-mail: keskin@erciyes.edu.tr

с критической температурой  $T_c = 30$  К [10]. Впоследствии было синтезировано большое число высокотемпературных сверхпроводников нового типа, таких как  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7+\delta}$  (YBCO) с  $T_c = 93$  К [11],  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$  (Bi-2223) с  $T_c = 110$  К [12],  $\text{Tl-Ba-Ca-Cu-O}$  с  $T_c = 125$  К [13],  $\text{Hg-Ba-Ca-Cu-O}$  с  $T_c = 125$  К [14] и  $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$  с  $T_c = 138$  К [15]. Однако до настоящего времени не создано ни одной теории, точно объясняющей механизм ВТСП. Тем не менее свойства ВТСП изучались при помощи нескольких методов, таких как моделирование Монте-Карло [16], двумерная модель Хаббарда [17], теория Асламазова – Ларкина [18], теория коллективного пиннинга [19], модель плотности тока [20], теория функционала плотности [21], модель критического состояния [22], подход Эйленбергера [23], метод конечных элементов [24] и теория эффективного поля [25–27].

Основное предпочтение в научных исследованиях и технологических приложениях отдавалось сверхпроводникам YBCO, обладающим такими свойствами [28], как высокая устойчивость фаз и качество монокристаллов, малое поверхностное сопротивление и большие возможности изменения стехиометрии по кислороду. Цель данной работы состоит в исследовании температурной зависимости магнитных моментов, гистерезисных свойств и фазовой диаграммы соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  в модели Изинга в рамках теории эффективного поля, развитой в работах [29–32]. Несмотря на то что теория эффективного поля широко применялась для исследования магнитных свойств различных магнитных систем (см. работы [33–43] и ссылки в них), соединение YBCO до сих пор остается не изученным. Также необходимо отметить, что модель Изинга для медно-оксидных сверхпроводников в рамках теории эффективного поля изучалась в работе [25]. Более того, недавно при помощи теории эффективного поля были исследованы соединения YBCO на объемно-центрированной орторомбической нано-решетке [26] и фазовая диаграмма эндодрического фуллера изинговского типа [27]. В разд. 2 данной работы описан теоретический подход, в разд. 3 представлены теоретические результаты и обсуждение, разд. 4 посвящен основным выводам.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Моделирование и описание соединения YBCO и его составляющих осуществляются на основе реальной структуры с орторомбической решеткой [44],

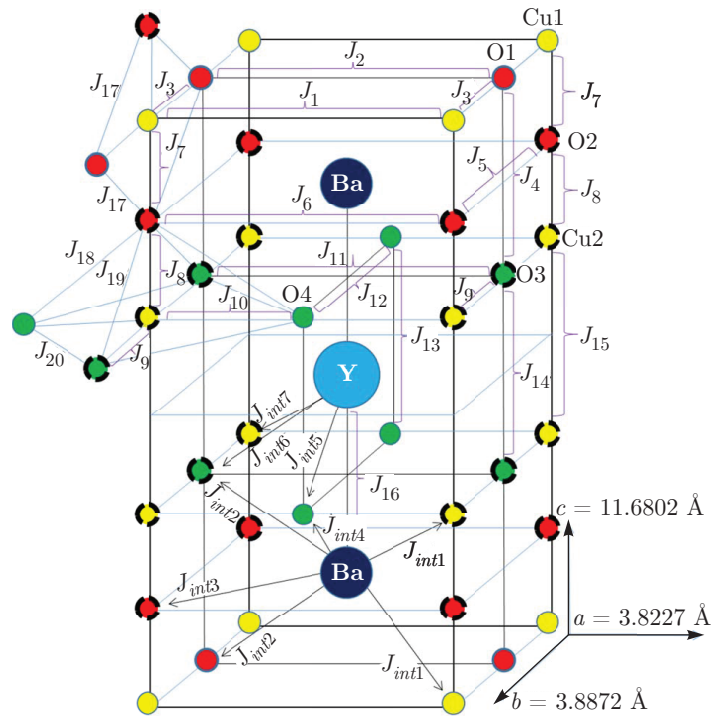


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схематическое изображение соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  и его составляющих (Cu1, Cu2, O1, O1, O3, O4, Ba и Y)

изображенной на рис. 1. Данная система содержит восемь различных по положениям в решетке магнитных элементов ( $m_{\text{Cu1}}$ ,  $m_{\text{Cu2}}$ ,  $m_{\text{O1}}$ ,  $m_{\text{O2}}$ ,  $m_{\text{O3}}$ ,  $m_{\text{O4}}$ ,  $m_{\text{Ba}}$  и  $m_{\text{Y}}$ ). Поскольку простейшая изинговская система состоит из частиц со спином 1/2, все элементы YBCO считаются изинговскими частицами со спином 1/2. Гамильтониан системы можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_1 \sum_{\langle \text{Cu1}, \text{Cu1} \rangle} S_{\text{Cu1}}^z S_{\text{Cu1}}^z - J_2 \sum_{\langle \text{O1}, \text{O1} \rangle} S_{\text{O1}}^z S_{\text{O1}}^z - \\ & - J_3 \sum_{\langle \text{Cu1}, \text{O1} \rangle} S_{\text{Cu1}}^z S_{\text{O1}}^z - J_4 \sum_{\langle \text{O1}, \text{O3} \rangle} S_{\text{O1}}^z S_{\text{O3}}^z - \\ & - J_5 \sum_{\langle \text{O2}, \text{O2} \rangle} S_{\text{O2}}^z S_{\text{O2}}^z - \\ & - J_6 \sum_{\langle \text{O2}, \text{O2} \rangle} S_{\text{O2}}^z S_{\text{O2}}^z - J_7 \sum_{\langle \text{O2}, \text{Cu1} \rangle} S_{\text{O2}}^z S_{\text{Cu1}}^z - \\ & - J_8 \sum_{\langle \text{O2}, \text{Cu2} \rangle} S_{\text{O2}}^z S_{\text{Cu2}}^z - J_9 \sum_{\langle \text{O3}, \text{Cu2} \rangle} S_{\text{O3}}^z S_{\text{Cu2}}^z - \\ & - J_{10} \sum_{\langle \text{O4}, \text{Cu2} \rangle} S_{\text{O4}}^z S_{\text{Cu2}}^z - J_{11} \sum_{\langle \text{O3}, \text{O3} \rangle} S_{\text{O3}}^z S_{\text{O3}}^z - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - J_{12} \sum_{\langle O4, O4 \rangle} S_{O4}^z S_{O4}^z - J_{13} \sum_{\langle text{O4}, O4 \rangle} S_{O4}^z S_{O4}^z - \\
& - J_{14} \sum_{\langle O3, O3 \rangle} S_{O3}^z S_{O3}^z - J_{15} \sum_{\langle Cu2, Cu2 \rangle} S_{Cu2}^z S_{Cu2}^z - \\
& - J_{16} \sum_{\langle Y, Ba \rangle} S_Y^z S_{Ba}^z - J_{17} \sum_{\langle O1, O2 \rangle} S_{O1}^z S_{O2}^z - \\
& - J_{18} \sum_{\langle O2, O4 \rangle} S_{O2}^z S_{O4}^z - J_{19} \sum_{\langle O2, O3 \rangle} S_{O2}^z S_{O3}^z - \\
& - J_{20} \sum_{\langle O3, O4 \rangle} S_{O3}^z S_{O4}^z - \\
& - J_{int1} \sum_{\langle Ba, Cu1 \text{ или } Cu2 \rangle} S_{Ba}^z S_{Cu1 \text{ или } Cu2}^z - \\
& - J_{int2} \sum_{\langle Ba, O1 \text{ или } O3 \rangle} S_{Ba}^z S_{O1 \text{ или } O3}^z - \\
& - J_{int3} \sum_{\langle Ba, O2 \rangle} S_{Ba}^z S_{O2}^z - \\
& - J_{int4} \sum_{\langle Ba, O4 \rangle} S_{Ba}^z S_{O4}^z - J_{int5} \sum_{\langle Y, O4 \rangle} S_Y^z S_{O4}^z - \\
& - J_{int6} \sum_{\langle Y, O3 \rangle} S_Y^z S_{O3}^z - J_{int7} \sum_{\langle Y, Cu2 \rangle} S_Y^z S_{Cu2}^z - \\
& - h \left( \sum_{Cu1} S_{Cu1}^z + \sum_{Cu2} S_{Cu2}^z + \sum_{O1} S_{O1}^z + \sum_{O2} S_{O2}^z + \right. \\
& \left. + \sum_{O3} S_{O3}^z + \sum_{O4} S_{O4}^z + \sum_{Ba} S_{Ba}^z + \sum_Y S_Y^z \right). \quad (1)
\end{aligned}$$

где символы  $S^z = \pm 1$  обозначают спиновые операторы Паули,  $h$  — внешнее магнитное поле. Константы  $J$  обозначают обменные взаимодействия между парами ближайших соседних атомов, например,  $J_1$  — это обменное взаимодействие между атомами медь-1 и медь-1 (Cu1–Cu1),  $J_2$  — между атомами медь-1 и кислород-1 (Cu1–O1) и т. д. Соединение YBCO имеет орторомбическую кристаллическую решетку с параметрами  $a = 3.8227 \text{ \AA}$ ,  $b = 3.8872 \text{ \AA}$  и  $c = 11.6802 \text{ \AA}$  [44]. Из этих параметров решетки получаются приведенные постоянные  $na = a/(1 \text{ \AA})$ ,  $nb = b/(1 \text{ \AA})$  и  $nc = c/(1 \text{ \AA})$ , а также параметры обменного взаимодействия  $J = k/nd$  ( $nd = na, nb, nc$ ), где  $k$  — константы, соответствующие ферромагнитному ( $k > 0$ ) и антиферромагнитному ( $k < 0$ ) обменным взаимодействиям [26, 41, 42, 45–48]. Реальные и приведенные параметры решетки, а также обменные взаимодействия YBCO приведены в таблице. В рамках теории эффективного поля [29–32] магнитные моменты Cu1, Cu2, O1, O1, O3, O4, Ba и Y получаются следующим образом:

$$\begin{aligned}
m_{Cu1} &= [\text{ch}(J_1 \nabla) + m_{Cu1} \text{sh}(J_1 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_3 \nabla) + m_{O1} \text{sh}(J_3 \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_7 \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_7 \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int1} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int1} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
m_{Cu2} &= [\text{ch}(J_{15} \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_{15} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_8 \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_8 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_9 \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_9 \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{10} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{10} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int1} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int1} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int7} \nabla) + m_Y \text{sh}(J_{int7} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
m_{O1} &= [\text{ch}(J_2 \nabla) + m_{O1} \text{sh}(J_2 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{17} \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_{17} \nabla)]^4 \times \\
& \times [\text{ch}(J_4 \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_4 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_3 \nabla) + m_{Cu1} \text{sh}(J_3 \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int2} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int2} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
m_{O2} &= [\text{ch}(J_5 \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_5 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_5 \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_5 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{17} \nabla) + m_{O1} \text{sh}(J_{17} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{19} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{19} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{18} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{18} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_7 \nabla) + m_{Cu1} \text{sh}(J_7 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_8 \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_8 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int3} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int3} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
m_{O3} &= [\text{ch}(J_{11} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{11} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{14} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{14} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{20} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{20} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{19} \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_{19} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_4 \nabla) + m_{O1} \text{sh}(J_4 \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_9 \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_9 \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int2} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int2} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int6} \nabla) + m_Y \text{sh}(J_{int6} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
m_{O4} &= [\text{ch}(J_{12} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{12} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{13} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{13} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{20} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{20} \nabla)]^4 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{18} \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_{18} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{10} \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_{10} \nabla)]^2 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int4} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{int4} \nabla)]^1 \times \\
& \times [\text{ch}(J_{int5} \nabla) + m_Y \text{sh}(J_{int5} \nabla)]^1 \times \\
& \times F_{S-1/2}(x)|_{x=0},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m_{Ba} &= [\text{ch}(J_{int1} \nabla) + m_{Cu1} \text{sh}(J_{int1} \nabla)]^4 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int1} \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_{int1} \nabla)]^4 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int2} \nabla) + m_{O1} \text{sh}(J_{int2} \nabla)]^2 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int2} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{int2} \nabla)]^2 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int3} \nabla) + m_{O2} \text{sh}(J_{int3} \nabla)]^4 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int4} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{int4} \nabla)]^2 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{16} \nabla) + m_Y \text{sh}(J_{16} \nabla)]^1 F_{S-1/2}(x)|_{x=0}, \\
 m_Y &= [\text{ch}(J_{int7} \nabla) + m_{Cu2} \text{sh}(J_{int7} \nabla)]^8 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int6} \nabla) + m_{O3} \text{sh}(J_{int6} \nabla)]^4 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{int5} \nabla) + m_{O4} \text{sh}(J_{int5} \nabla)]^4 \times \\
 &\times [\text{ch}(J_{16} \nabla) + m_{Ba} \text{sh}(J_{16} \nabla)]^2 F_{S-1/2}(x)|_{x=0},
 \end{aligned} \tag{2}$$

где дифференциальный оператор и функция  $F_{S-1/2}(x)$  для изинговских частиц со спином 1/2 определяются формулой

$$F_{S-1/2}(x) = \text{th}[\beta(x+h)]. \tag{3}$$

В формуле (3)  $\beta = 1/k_B T_A$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T_A$  — абсолютная температура. Во всех вычислениях используются приведенные температура  $T = k_B T_A / J_{10}$  и внешнее поле  $H = h / J_{10}$ .

Работа направлена на изучение влияния антиферромагнитного взаимодействия (ориентация спинов вниз) между оболочкой CuO и ядром YBa на магнитные свойства YBCO. Для этого соответствующие обменные константы выбираются отрицательными ( $J_{int_i} < 0$ ,  $i = 1-7$ ), а остальные считаются положительными (значения обменных интегралов приведены в таблице). Полный магнитный момент оболочки CuO, ядра YBa и системы в целом получаются на основе рис. 1 следующим образом:

$$\begin{aligned}
 M_{Cu1,2-O1,2,3,4-Shell}^T &= \frac{1}{68} (8m_{Cu1} + 8m_{Cu2} + \\
 &+ 12m_{O1} + 16m_{O2} + 12m_{O3} + 12m_{O4}), \\
 M_{YBa-Core}^T &= \frac{1}{3} (m_Y + 2m_{Ba}), \\
 M_{YBCO}^T &= \frac{1}{71} (m_Y + 2m_{Ba} + 8m_{Cu1} + 8m_{Cu2} + \\
 &+ 12m_{O1} + 16m_{O2} + 12m_{O3} + 12m_{O4}).
 \end{aligned} \tag{4}$$

Численные решения уравнений (1)–(4) представлены ниже на рис. 2–5.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Прежде всего были получены зависимости магнитных моментов соединения YBCO и его элементов от температуры для ориентации спинов Cu1, Cu2,

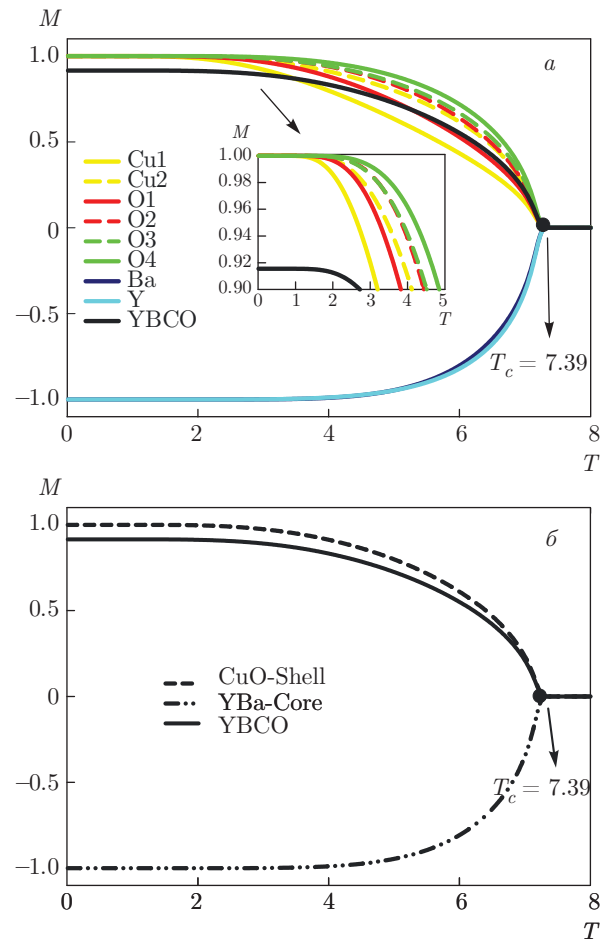


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости  $M(T)$  для соединения  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  и его составляющих: а — атомов Cu1, Cu2, O1, O1, O3, O4, Ba и Y; б — оболочки CuO, ядра YBa и соединения в целом

O1, O1, O3 и O4 вверх ( $\uparrow$ ,  $J_1 - J_{20} > 0$ ) и спинов Ba и Y вниз ( $\downarrow$ ,  $J_{int1} - J_{int7} < 0$ ). На рис. 2а показаны температурные зависимости магнитных моментов Cu1, Cu2, O1, O1, O3, O4, Ba и Y. Система YBCO и ее элементы переходят из антиферромагнитной фазы в парамагнитную при температуре  $T_c = 7.39$ . При  $T = 0$  значения магнитных моментов составляют  $m_{Cu1} = m_{Cu2} = m_{O1} = m_{O2} = m_{O3} = m_{O4} = 1.0$ ,  $m_{Ba} = m_Y = -1.0$  и  $M_{YBCO}^T = 0.915493$ . При температурах ниже критической, например, при  $T = 5$  магнитные моменты равны  $m_{Cu1} = 0.632798$ ,  $m_{Cu2} = 0.798292$ ,  $m_{O1} = 0.735509$ ,  $m_{O2} = 0.831387$ ,  $m_{O3} = 0.845494$ ,  $m_{O4} = 0.883767$ ,  $m_{Ba} = -0.945119$ ,  $m_Y = -0.946387$  и  $M_{YBCO}^T = 0.725233$ . Очевидно, значение полного магнитного момента системы  $M_{YBCO}^T = 0.725233$  очень близко к значению магнитного момента  $m_{O1} = 0.735509$ . По этой причине при приближении к  $T_c$  магнитный момент атомов

Таблица. Реальные и приведенные параметры решетки и величины обменных взаимодействий в соединении  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

Приведенные параметры решетки	Обменные взаимодействия
$na = a/(1 \text{ \AA}) = 3.8227 \text{ \AA}/(1 \text{ \AA}) = 3.8227$ [43]	$J = k/nd_i, i = 1-20$ или $i = 1-7$ ; $k = 1$ для спина $\uparrow$ и $k = -1$ для спина $\downarrow$
$nb = b/(1 \text{ \AA}) = 3.8872 \text{ \AA}/(1 \text{ \AA}) = 3.8872$ [43]	
$nc = c/(1 \text{ \AA}) = 11.6802 \text{ \AA}/(1 \text{ \AA}) = 11.6802$ [43]	
$nd_1 = na/(na/2) = 2$	$J_1 = 0.5$
$nd_2 = na/(na/2) = 2$	$J_2 = 0.5$
$nd_3 = (nb/2)/(na/2) = 1.01687$	$J_3 = 0.983407$
$nd_4 = (nc/3)/(na/2) = 2.03699$	$J_4 = 0.490921$
$nd_5 = (nb)/(na/2) = 0.491704$	$J_5 = 0.491704$
$nd_6 = (na)/(na/2) = 2$	$J_6 = 0.5$
$nd_7 = (nc/6)/(na/2) = 1.01849$	$J_7 = 0.981841$
$nd_8 = (nc/6)/(na/2) = 1.01849$	$J_8 = 0.981841$
$nd_9 = (nb/2)/(na/2) = 1.01687$	$J_9 = 0.983407$
$nd_{10} = (na/2)/(na/2) = 1$	$J_{10} = 1$
$nd_{11} = (na)/(na/2) = 2$	$J_{11} = 0.5$
$nd_{12} = (nb)/(na/2) = 2.03375$	$J_{12} = 0.491704$
$nd_{13} = (nc/3)/(na/2) = 2.03699$	$J_{13} = 0.490921$
$nd_{14} = (nc/3)/(na/2) = 2.03699$	$J_{14} = 0.490921$
$nd_{15} = (nc/3)/(na/2) = 2.03699$	$J_{15} = 0.490921$
$nd_{16} = (nc/3)/(na/2) = 2.03699$	$J_{16} = 0.490921$
$nd_{17} = [(nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.43922$	$J_{17} = 0.694819$
$nd_{18} = [(na/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.42735$	$J_{18} = 0.700598$
$nd_{19} = [(nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.43922$	$J_{19} = 0.694819$
$nd_{20} = [(na/na)^2 + (nb/na)^2]^{1/2} = 1.42619$	$J_{20} = 0.701167$
$nd_{int1} = [(na/na)^2 + (nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.75253$	$J_{int1} = 0.570604$
$nd_{int2} = [(na/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.42735$	$J_{int2} = 0.700598$
$nd_{int3} = [(na/na)^2 + (nb/na)^2]^{1/2} = 1.42619$	$J_{int3} = 0.701167$
$nd_{int4} = [(nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.43922$	$J_{int4} = 0.694819$
$nd_{int5} = [(nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.43922$	$J_{int5} = 0.694819$
$nd_{int6} = [(na/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.42735$	$J_{int6} = 0.700598$
$nd_{int7} = [(na/na)^2 + (nb/na)^2 + (nc/3na)^2]^{1/2} = 1.75253$	$J_{int7} = 0.570604$

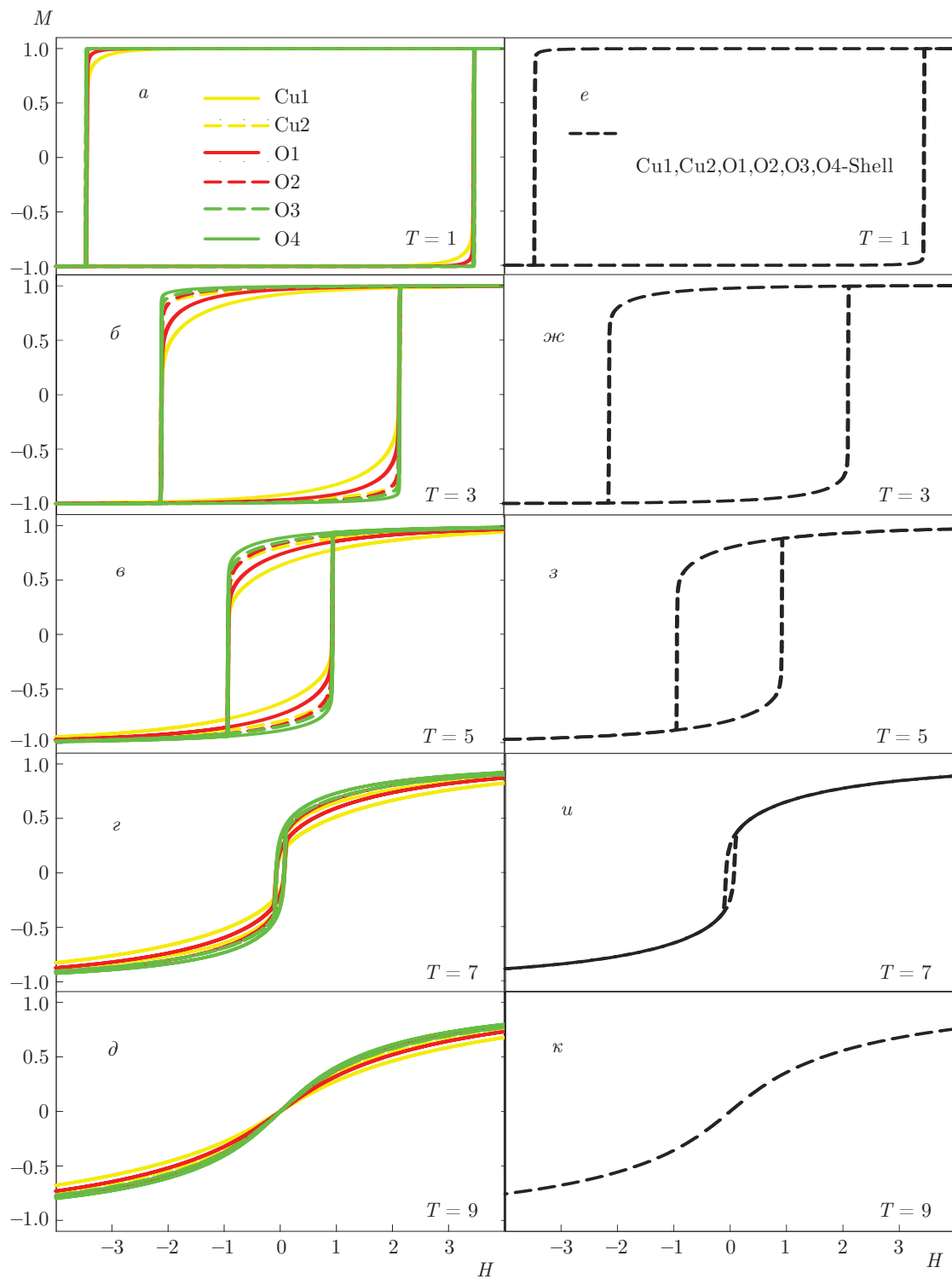


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости  $M(H)$  для атомов Cu1, Cu2, O1, O2, O3, O4 (a-d) и оболочки CuO (e-k) при  $T = 1, 3, 5, 7, 9$

кислорода-1 очень важен для предсказания полного магнитного момента YBCO в антиферромагнитном случае. Более того, при  $T = 5$  магнитный момент атомов меди-1 ( $m_{Cu1} = 0.632798$ ) является наименьшим, а абсолютное значение магнитного момента иттрия ( $|m_Y| = 0.946387$ ) — наибольшим из всех других. Таким образом, магнитные моменты атомов в YBCO при постоянной температуре ниже  $T_c$  возрастают от угла орторомбической решетки к ее центру. Похожее поведение было недавно обнаружено в сплаве Гейслера NiMnSn со структурой решетки  $L_{21}$ , названное в работе [49] «эффектом положения в решетке». Атомы кислорода и меди проявляют различные магнитные свойства вследствие различного положения в орторомбической решетке, поэтому для них вводятся обозначения O1, O2, O3, O4, Cu1 и Cu2. На рис. 2б показаны температурные зависимости магнитных моментов оболочки CuO, ядра YBa и всей системы YBCO. При  $T = 0$  значения магнитных моментов составляют  $M_{CuO}^T = 1$  для оболочки CuO,  $M_{YBa}^T = -1$  для ядра YBa и  $M_{YBCO}^T = 0.915493$  для всей системы. Ниже критической температуры, например, при  $T = 5$  величины магнитных моментов составляют  $M_{CuO}^T = 0.798944$  для оболочки CuO,  $M_{YBa}^T = -0.945542$  для ядра YBa и  $M_{YBCO}^T = 0.725233$  для всей системы. Вследствие того, что при  $T = 0$  спины атомов Ba и Y ориентированы вниз, величина магнитного момента YBCO оказывается меньше, чем у оболочки CuO и ядра YBa.

На рис. 3 показаны магнитные моменты атомов кислорода и меди в зависимости от внешнего магнитного поля для различных приведенных температур. Критические коэрцитивные поля атомов Cu1, Cu2, O1, O2, O3, O4 (рис. 3а-д) составляют  $H_c = \pm 3.47, \pm 2.13, \pm 0.94, \pm 0.008, 0.00$  соответственно при  $T = 1, 3, 5, 7, 9$ . При  $T < T_c$ , например при  $T = 5$ , величины остаточных магнитных моментов составляют  $M_{Cu1}^R = 0.6328$ ,  $M_{Cu2}^R = 0.798293$ ,  $M_{O1}^R = 0.73551$ ,  $M_{O2}^R = 0.831388$ ,  $M_{O3}^R = 0.845495$ ,  $M_{O4}^R = 0.883768$ . За счет «эффекта положения в решетке» остаточные магнитные моменты атомов кислорода и меди имеют различные значения. Остаточные магнитные моменты и критические коэрцитивные поля атомов Cu1, Cu2, O1, O2, O3 и O4 обращаются в нуль при  $T = 9 > T_c$ , при этом атомы кислорода и меди демонстрируют парамагнитное гистерезисное поведение. На рис. 3е-ж показаны зависимости магнитных моментов оболочки CuO от внешнего магнитного поля при температурах  $T = 1, 3, 5, 7, 9$ . Значения критических коэрцитивных полей оболочки CuO (рис. 3е-ж) составляют соответственно  $H_c = \pm 3.47, \pm 2.13, \pm 0.94, \pm 0.008, 0.00$  при  $T = 1,$

3, 5, 7, 9. При  $T < T_c$ , например при  $T = 5$ , величина остаточного магнитного момента оболочки CuO составляет  $M_{CuO}^R = 0.798944$ . Остаточные магнитные моменты и критические коэрцитивные поля атомов Cu1, Cu2, O1, O2, O3 и O4 обращаются в нуль при  $T = 9 > T_c$ , при этом оболочка CuO демонстрирует парамагнитное гистерезисное поведение.

На рис. 4 показаны петли гистерезиса бария, иттрия и ядра YBa при температурах  $T = 1, 3, 5, 7, 9$ . На рис. 4а-д видно, что зависимости критических коэрцитивных полей и формы кривых гистерезиса бария, иттрия и ядра YBa существенно отличаются от таковых для других составляющих системы (ср. рис. 4 и рис. 3). В частности, барий, иттрий и ядро YBa имеют два различных коэрцитивных поля, в то время как остальные элементы — только одно. Величины  $H_{c1}$  для бария, иттрия и ядра YBa равны  $H_{c1} = \pm 3.47, \pm 2.13, \pm 0.94, \pm 0.008, 0.00$  соответственно при  $T = 1, 3, 5, 7, 9$ . При этих же температурах получены следующие значения  $H_{c2}$ :  $\pm 11.21, \pm 11.37, \pm 11.41, \pm 11.29, \pm 10.9$  для бария,  $\pm 10.75, \pm 10.48, \pm 10.34, \pm 10.1, \pm 9.61$  для иттрия и  $\pm 11.04, \pm 11.05, \pm 11.04, \pm 10.88, \pm 10.45$  для ядра YBa. Величина  $H_{c2}$  для бария выше, чем для иттрия. Значения  $H_{c1}$  для бария, иттрия и ядра YBa обращаются в нуль при  $T > T_c$ . На рис. 5 видно, что значения  $H_{c2}$  для иттрия и ядра YBa обращаются в нуль при температуре  $T_v = 17$ , а для бария — при температуре  $T_v = 18$ .

На рис. 5 построена фазовая диаграмма сверхпроводимости бария, иттрия и ядра YBa. Верхнее и нижнее критические коэрцитивные поля при  $T = 1-20$  получены из кривых гистерезиса. Обнаружено, что критическая температура вихревого состояния для иттрия и ядра YBa,  $T_v = 17$ , меньше критической температуры перехода из вихревого в нормальное состояние для бария,  $T_v = 18$ . Таким образом, на рис. 5 видно, что барий, иттрий и ядро YBa имеют фазовую диаграмму сверхпроводника II рода, включающую в себя мейсснеровское состояние при  $H < H_{c1}$ , вихревое состояние при  $H_{c1} < H < H_{c2}$  и нормальное состояние при  $H > H_{c2}$ . Гистерезисное поведение сверхпроводимости и фазовая диаграмма сверхпроводника II рода для бария, иттрия и ядра YBa хорошо согласуются с экспериментальными результатами работы [44].

#### 4. ВЫВОДЫ

Изучены магнитные свойства высокотемпературного сверхпроводника  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  в модели Изинга в рамках теории эффективного поля. Полу-

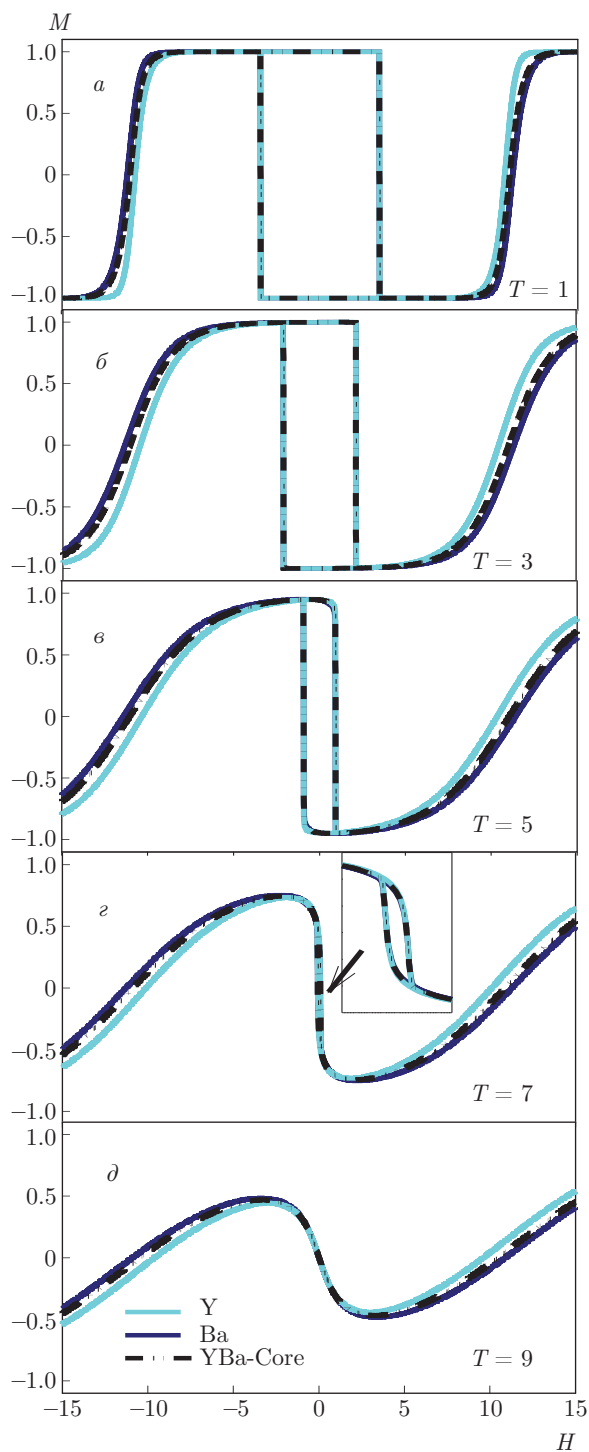


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости  $M(H)$  для бария, иттрия и ядра YBa при  $T = 1, 3, 5, 7, 9$

ченны зависимости магнитных моментов всего соединения и его элементов от температуры и внешнего магнитного поля. Обнаружены следующие важные и интересные явления.

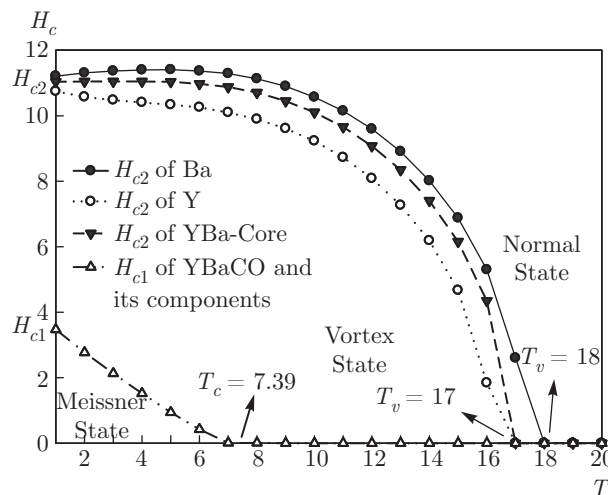


Рис. 5. Фазовые диаграммы сверхпроводимости бария, иттрия и ядра YBa

1) Фазовый переход II рода из антиферромагнитной в парамагнитную фазу (рис. 2) и фазовый переход из мейсснеровского в вихревое состояние при  $T_c = 7.39$  (см. рис. 5) для всех элементов YBCO.

2) Благодаря различным положениям в орторомбической решетке атомы меди имеют два различных магнитных момента (Cu1 и Cu2), а атомы кислорода — четыре (O1, O2, O3 и O4) (см. рис. 2a). Таким образом, магнитные свойства атома в любой системе изменяются при изменении положения в решетке.

3) При  $T < T_c$  магнитные моменты атомов Cu1 при различных температурах и внешних магнитных полях являются наименьшими, а атомов иттрия — наибольшими из всех. Следовательно, магнитные моменты атомов в соединении YBCO увеличиваются от угла орторомбической решетки к ее центру (см. рис. 3a-d).

4) Ядро YBa, а также атомы иттрия и бария проявляют сверхпроводящие гистерезисные свойства для ориентации спинов бария и иттрия вниз. Их фазовые диаграммы включают в себя мейсснеровское, вихревое и нормальное состояния. Верхнее критическое поле  $H_{c2} = 11.21$  при  $T = 1$  и критическая температура  $T_v = 18$  перехода из вихревого в нормальное состояние для бария выше, чем для иттрия ( $H_{c2} = 10.75$  и  $T_v = 17$ ) и для ядра YBa ( $H_{c2} = 11.04$  и  $T_v = 17$ ) (см. рис. 4, 5).

5) Для ориентации спинов бария и иттрия вниз наблюдались наименьшие остаточные магнитные моменты.

Работа поддержана Советом по научным и техническим исследованиям Турции (грант 116R071)



и Фондом исследований Университета Эрджиес (грант FDA-2017-7675). Авторы также выражают благодарность вычислительному центру Университета Эрджиес.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. K. Onnes, Comm. Leiden 122b (1911).
2. W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften **21**, 787 (1933).
3. F. London and H. London, Proc. Roy. Soc. London A **149**, 71 (1935).
4. В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **20**, 1064 (1950).
5. A. Mourachkine, *Room-Temperature Superconductivity*, Cambridge Internat. Sci. Publ., Cambridge (2004).
6. M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, McGraw-Hill Inc., Singapore (1996).
7. J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1999).
8. А. А. Абрикосов, ЖЭТФ **32**, 1442 (1957) [Sov. Phys. JETP **32**, 1174 (1957)].
9. J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
10. J. G. Bednorz and K. A. Muller, Z. Phys. B: Condens. Matter **64**, 189 (1986).
11. M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng et al., Phys. Rev. Lett. **58**, 908 (1987).
12. H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi, and T. Asano, Jpn. J. Appl. Phys. **27**, L209 (1988).
13. S. S. P. Parkin, V. Y. Lee, A. I. Nazzal et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 750 (1988).
14. A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, and H. R. Ott, Nature **363**, 56 (1993).
15. P. Dai, B. C. Chakoumakos, G. F. Sun et al., Physica C **243**, 201 (1995).
16. V. I. Pinera, C. M. Cruz, Y. Abreu, and A. Leyva, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **266**, 4899 (2008).
17. N. Bulut, Physica C **353**, 279 (2001).
18. Y. Slimani, E. Hannachi, M. K. B. Salem et al., J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 3001 (2015).
19. L. Shlyk, G. Krabbes, G. Fuchs et al., Physica C **377**, 437 (2002).
20. H. Ghamlouche, J. Supercond. Nov. Magn. **17**, 275 (2004).
21. U. Schwingenschlogl and C. Schuster, Appl. Phys. Lett. **100**, 253111 (2012).
22. F. Inanir, S. Yildiz, K. Ozturk, and S. Celebi, Chinese Phys. B **22**, 077402 (2013).
23. I. Zakharchuk, A. Sharafeev, P. Belova et al., IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. **49**, 012023 (2013).
24. J. Duron, F. Grilli, L. Antognazza et al., Supercond. Sci. Technol. **20**, 338 (2007).
25. I. T. Padilha, J. Ricardo de Sousa, M. A. Neto et al., Physica A **392**, 4897 (2013).
26. N. Sarli, J. Supercond. Nov. Magn. **28**, 2355 (2015).
27. E. Kantar, Sol. St. Comm. **263**, 31 (2017).
28. A. B. Karci, M. Tepe, and H. Sozeri, J. Phys.: Conf. Ser. **153**, 012016 (2009).
29. T. Kaneyoshi, Acta Phys. Polon. A **83**, 703 (1993).
30. T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **321**, 3430 (2009).
31. T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **321**, 3630 (2009).
32. T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **322**, 3410 (2010).
33. M. Keskin, N. Şarli, and B. Deviren, Sol. St. Comm. **151**, 1025 (2011).
34. U. Akinci, Y. Yuksel, and H. Polat, Phys. Rev. E **83**, 061103 (2011).
35. C. D. Wang and R. G. Ma, Physica A **392**, 3570 (2013).
36. A. Zaim, M. Kerouad, and M. Boughrara, J. Magn. Magn. Mater. **331**, 37 (2013).
37. S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane et al., J. Magn. Magn. Mater. **336**, 75 (2013).
38. M. Keskin, B. Deviren, and Y. Sener, Physica A **392**, 3969 (2013).
39. W. Jiang, Y. N. Wang, A. B. Guo et al., Carbon **110**, 41 (2016).
40. W. Jiang and Y. N. Wang, J. Magn. Magn. Mater. **426**, 785 (2017).
41. N. Şarli, Physica E **83**, 22 (2016).

42. N. Şarli, *Diamond and Related Mater.* **64**, 103 (2016).
43. E. Kantar, *J. Alloys Comp.* **676**, 337 (2016).
44. V. L. De Los Santos, D. A. Bustamante, J. C. Gonzalez et al., *Open Supercond. J.* **2**, 19 (2010).
45. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York (1996), pp. 333–378.
46. N. Şarli, *Physica E* **63**, 324 (2014).
47. M. Keskin and N. Şarli, *J. Magn. Magn. Mater.* **437**, 1 (2017).
48. N. Şarli, S. Akbudak, Y. Polat, and M. R. Ellialtioglu, *Physica A* **434**, 194 (2015).
49. A. Duran, *J. Supercond. Nov. Magn.* **31**, 1101 (2018).