

- [4] Wolf E. L. Principles of Electron Tunneling Spectroscopy. Oxford: Oxford University Press, 1985. 576 p.
 [5] Shen L. Y. L., Rowell J. M. // Phys. Rev. 1968. V. 165. N 2. P. 566—577.
 [6] Белоголовский М. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 2. С. 564—566.
 [7] Свистунов В. М., Белоголовский М. А., Черняк О. И., Хачатуров А. И., Кивачев А. П. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 5. С. 1781—1791.
 [8] Паршин П. П., Землянов М. Г., Черноплеков Н. А. и др. // Сверхпроводимость. М., ИАЭ, 1988. В. 2. С. 34.
 [9] Zeller H. R., Giaever I. // Phys. Rev. 1969. V. 181. N 2. P. 789—899.
 [10] Элиашберг Г. М. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. № 65. С. 275—278.

Донецкий физико-технический
 институт АН УССР
 Донецк

Поступило в Редакцию
 24 августа 1988 г.
 В окончательной редакции
 30 января 1989 г.

УДК 539.196

Физика твердого тела, том 31, в. 6, 1989
 Solid State Physics, vol. 31, № 6, 1989

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ В ИОННОЙ МОДЕЛИ

В. Р. Белослудов, М. Ю. Лаврентьев, С. А. Сыскин

К настоящему времени выполнен ряд работ [1-6] по исследованию колебательных спектров высокотемпературных сверхпроводников $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Эти работы дали возможность установить положение основных особенностей в ИК и КР спектрах, а также поляризацию соответствующих колебаний. Активно разрабатываются различные теоретические подходы к изучению решеточной динамики ВТСП [7-9]. Нами предлагается модель межатомных взаимодействий в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, которая позволяет провести расчеты колебательных свойств этой системы.

Модель основана на предположении о доминирующем характере ионной связи по сравнению с металлической (так, в [10] отмечено, что в формировании ионной связи вносят вклад около 20 электронов на элементарную ячейку, а в формировании металлической связи участвуют всего 1—2 электрона проводимости на ячейку). Она включает в себя взаимодействие зарядов и короткодействующий отталкивательный потенциал типа Борна—Майера

$$\varphi_{AB}(r) = Z_A Z_B r^{-1} + b_{AB}^{\beta} \exp\{(r_A + r_B - r)/\rho\},$$

$$Z_{A, B} = f e_{A, B},$$

где e_A, e_B — валентности атомов А, В; f — степень ионности (в нашей модели $f=0.45$); $b=60$ кДж/моль; $\beta_{++}=1.5$; $\beta_{+-}=1.125$; $\beta_{--}=0.75$; $\rho=0.3333$ Å; $r_{A, B}$ — ионные радиусы атомов А, В. Был выбран вариант распределения зарядов, в котором $e_O = -2$, $e_{\text{Cu}(1)} = +2$; $e_{\text{Cu}(2)} = +3$; $e_Y = +3$, $e_{\text{Ba}} = +2$, где Cu (2) — атомы меди, расположенные в медь-кислородных цепочках; Cu (1) — атомы меди, расположенные в медь-кислородных слоях.

Расчет показал, что собственные частоты колебаний лежат в интервале 0—680 см^{-1} , причем низкочастотные колебания (0—200 см^{-1}) соответствуют преимущественно движениям тяжелых атомов (Y, Ba, Cu). Высокочастотные колебания соответствуют смещениям атомов кислорода. Верхняя граница колебательного спектра равна приблизительно 680 см^{-1} и соответствует колебаниям атомов кислорода из медь-кислородных слоев (O_2, O_3) в плоскости слоев. A_g -колебания, активные в КР спектре, имеют частоты 117, 135, 309, 404 и 520 см^{-1} . Три из них с максимальными частотами соответствуют колебаниям кислородных атомов (эксперимен-

тальные данные — 335, 435 и 505 см^{-1}). При этом расчет собственных векторов показывает, что колебания с частотами 309 и 520 см^{-1} соответствуют смещениям атомов кислорода O2, O3, причем колебание с более высокой частотой отвечает параллельному смещению атомов в одном слое. Колебание с частотой 404 см^{-1} — смещение атомов кислорода, соединяющих слои и цепочки (O4). Этот результат расходится с уже устоявшейся точкой зрения, согласно которой A_g -мода с максимальной частотой соответствует колебанию главным образом атомов O4 [1]. По-видимому, причиной расхождения является недостаточно учитываемая ионной моделью роль ковалентных связей Cu—O. С другой стороны, модели межатомных взаимодействий, основанные на наборах силовых констант, т. е. учитывающие только короткодействующее (в том числе ковалентное) взаимодействие, явно занижают разницу частот между синфазным и несинфазным A_g -колебаниями атомов O2, O3 ($\Delta\omega=24 \text{ см}^{-1}$ [8], 21 см^{-1} [9], в то время как

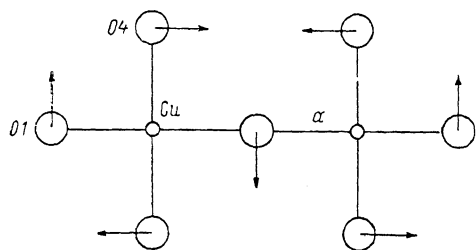


Рис. 1. Смещения атомов кислорода, отвечающие колебанию с частотой 642 см^{-1} . $\mathbf{q}=(\pi/a, 0, 0)$.

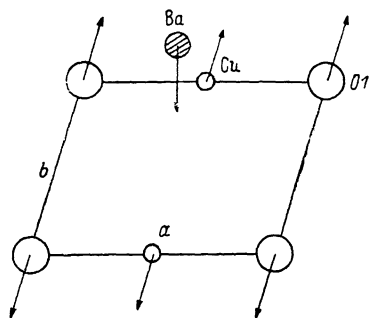


Рис. 2. Смещения атомов, отвечающие колебанию с частотой 31 см^{-1} . $\mathbf{q}=(0, \pi/b, 0)$.

экспериментальные данные $\Delta\omega \approx 100 \text{ см}^{-1}$). Следует ожидать, что наиболее полное описание эксперимента (как собственных частот, так и собственных векторов колебаний) может дать модель, учитывающая все межатомные взаимодействия.

В работе [5] отмечено возникновение частоты 640 см^{-1} в спектре КРС в интервале температур 200—240 К. Это колебание связывается в [5] с образованием метастабильных комплексов CuO_6 . Наши расчеты показывают, что частоту 642 см^{-1} имеет колебание атомов O из цепочек (O1) с волновым вектором $\mathbf{q}=(\pi/a, 0, 0)$ (рис. 1). Это колебание может стать активным в спектре КРС в случае дефицита кислорода в цепочках.

Частоты (см^{-1}) активных в спектре КРС колебаний $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ с изотопом ^{16}O и изотопический сдвиг $\Delta\omega = \omega(^{16}\text{O}) - \omega(^{18}\text{O})$ при замене изотопа кислорода

[11]		[12]		[13]		Наш расчет	
$\omega(^{16}\text{O})$	$\Delta\omega$	$\omega(^{16}\text{O})$	$\Delta\omega$	$\omega(^{16}\text{O})$	$\Delta\omega$	$\omega(^{16}\text{O})$	$\Delta\omega$
592	21	588	24	—	—	562 558	32 31
501	18	506	17	498	27		
433	13	438	10	—	—	404	22
—	—	336	12	335	18	309	17
—	—	150	0	—	—	135	0

Отметим, что в направлении $(0, \xi, 0)$ одна из фоновых мод существенно смягчается при приближении к границе зоны Бриллюэна. В нашей модели ее частота при $\mathbf{q}=(0, \pi/b, 0)$ равна 31 см^{-1} . Смещения атомов, соответствующие этому колебанию, изображены на рис. 2. Незначительное изменение

параметров межатомного взаимодействия понижает эту частоту, приводя к неустойчивости модельной системы.

В работах [2, 11-13] проведены исследования по изучению сдвига частот КРС при замене в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ изотопа ^{16}O на ^{18}O . Результаты работ [11-13] совместно с результатами наших расчетов приведены в таблице. Видно, что как эксперимент, так и расчет дают наибольший изотопический сдвиг для наиболее высоких частот, связанных с колебаниями атомов кислорода. Различия в численных значениях величины изотопического сдвига в [11, 12] могут быть связаны, по нашему мнению, с неполным замещением ^{16}O на ^{18}O в экспериментах. Действительно, результаты работы [13], в которой синтез $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ проводился в атмосфере ^{18}O , практически совпадают с нашими расчетами.

Таким образом, нами разработана простая ионная модель межатомных взаимодействий в кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, позволяющая описывать динамические свойства этой системы. Дальнейшее развитие модели с учетом металлической и ковалентной связи позволит оценить применимость традиционного механизма сверхпроводимости к ВТСП.

Авторы благодарят Е. Г. Максимова, О. В. Долгова, Ю. А. Успенского, В. В. Пушкарёва, П. П. Парицина за полезные обсуждения работы.

Список литературы

- [1] Cardona M., Genzel L., Liu R., Wittlin A., Mattausch H., Garcia-Alvarado F., Garcia-Gonzalez E. // Sol. St. Comm. 1987. V. 64. N 5. P. 727—732.
- [2] Баженов А. В., Гаспаров Л. В., Кулаковский В. Д., Мисочко О. В., Осипьян Ю. А., Тимофеев В. Б. // Письма в ЖЭТФ, 1988. Т. 47. № 3. С. 162—165.
- [3] Александров И. В., Быков А. Б., Гончаров А. Ф., Денисов В. Н., Маврин Б. Н., Мельников О. В., Подобедов В. Б. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 4. С. 184—187.
- [4] Мирлин Д. Н., Решина И. И. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 6. С. 315—317.
- [5] Ребане Л. А., Флмберг Т. А., Фефер Е. М., Елумберг Г. Э., Иоон Э. Р. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 7. С. 360—363.
- [6] Кулаковский В. Д., Мисочко О. В., Тимофеев В. Б., Еремец М. И., Ицкевич Е. С., Стружкин В. В. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 10. С. 536—538.
- [7] Bruesch P., Bührer W. Z. // Phys. B — Condens. Matt. 1988. V. 70. N 1. P. 1—7.
- [8] Bates F. E., Eldridge J. E. // Sol. St. Comm. 1987. V. 64. N 12. P. 1435—1439.
- [9] McMullan W. G., Gyugaj S., Irwin J. C. // Sol. St. Comm. 1988. V. 66. N 2. P. 165—169.
- [10] Гинзбург В. Л., Киржниц Д. А. // УФН. 1987. Т. 152. № 4. С. 575—582.
- [11] Batlogg B., Cava R. J., Jayaraman A., van Dover R. B., Kourouklis G. A., Sunshine S., Murphy D. W., Rupp L. W., Chen H. S., White A., Short K. T., Mujsc A. M., Rietman E. A. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 22. P. 2333—2336.
- [12] Katayama-Yoshida H., Hirooka T., Mascaranas A. J., Okabe Y., Takahashi T., Sasaki T., Ochiai A., Suzuki T., Pankove J. I., Ciszek T., Deb S. K. // Jap. J. Appl. Phys. 1987. V. 26. N 12. P. L2085—L2086.
- [13] Thomsen C., Mattausch H., Bauer M., Bauhofer W., Liu R., Genzel R., Cardona M. // Sol. St. Comm. 1988. V. 67. N 11. P. 1069—1072.

Институт неорганической химии
СО АН СССР
Новосибирск

Поступило в Редакцию
4 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
31 января 1989 г.

ВЯЗКОЕ ТОРМОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ NaCl

А. М. Петченко, В. И. Мозговой, А. Ф. Сиренко

Задача исследования характера зависимости коэффициента торможения дислокаций B от плотности дислокаций Λ представляется весьма актуальной, поскольку величина B используется для анализа механизмов, контролирующих вязкое [1], термофлуктуационное [2] движения и т. д.