

## СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И МЕЖСЛОЕВОЙ ПЕРЕХОД ЗАРЯДА В ВТСП ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

© С.Ш.Шильштейн

Российский научный центр «Курчатовский институт»,  
123182 Москва, Россия  
(Поступила в Редакцию 13 сентября 1995 г.  
В окончательной редакции 1 февраля 1996 г.)

1. Определение валентностей ионов из длин связей по результатам дифракционных экспериментов дает возможность судить о межслоевой передаче заряда, играющей важную роль в понимании свойств ВТСП [1,2]. Однако при воздействии высоких давлений изменения длин связей невелики [3-8], и надежно определить величину межслоевой передачи заряда под давлением пока не удается.

В данной работе сделана попытка определения межслоевой передачи заряда в ВТСП при воздействии высоких давлений по изменению расщепления слоя (BaO). В [1] было отмечено, что в  $YBa_2Cu_3O_{7-y}$  этот слой разделен на два слоя:  $(Ba^{+2})$  и  $(O^{-2})$ . Направление смещений ( $Ba^{+2}$  в сторону отрицательно заряженного соседнего слоя ( $CuO_2$ ) и  $O^{-2}$  в сторону положительно заряженного соседнего слоя ( $CuO_{1-y}$ )) указывает на то, что они обусловлены электростатическим (кулоновским) воздействием соседних слоев. В [9] предложена модель взаимодействия с соседними слоями, которая позволяет связать величину кулоновского расщепления слоев (BaO) с разницей зарядов соседних слоев, и найдена эмпирическая зависимость расщепления слоя (BaO)  $\Delta$  от разницы зарядов соседних слоев  $Q$

$$\Delta = -0.045 + 0.2475Q, \quad (1)$$

где  $Q = q_r - q_c$ ,  $q_r$  — заряд слоя, играющего роль резервуара заряда (слоя печочной меди в случае иттрий-бариевых купратов или ртутного слоя в случае ртутных купратов),  $q_c$  — заряд проводящего слоя ( $CuO_2$ ). Оба заряда даны в расчете на элементарную ячейку. В (1) и далее заряды выражены в единицах  $|e|$  (где  $e$  — заряд электрона), а расщепление — в ангстремах. На основе этого соотношения в данной работе определяются слоевые заряды и их изменение при высоком давлении в иттрий-бариевых и ртутных купратах с использованием данных [3-7] об их структуре.

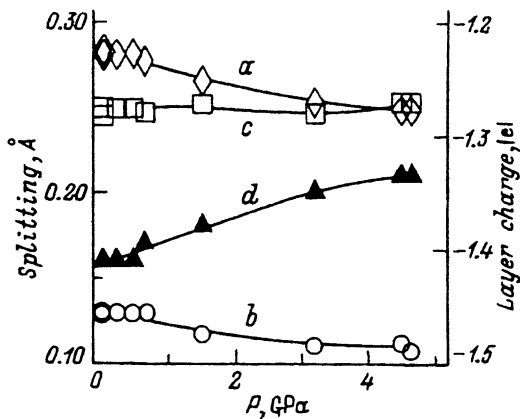


Рис. 1. Зависимость расщепления слоев (BaO) (a), (CuO) (b) и (CuO) (c) и заряда слоев (CuO<sub>2</sub>) (d) в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> от давления.

2. YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub>. В решетке этого купрата рядом находятся три расщепленных слоя: (CuO), (BaO) и (CuO<sub>2</sub>); природа их расщепления обсуждается в [9-11]. По данным [4,5], расщепление (CuO<sub>2</sub>) остается практически неизменным, в то время как уменьшение расщепления слоя (BaO) при  $P \cong 4.5$  GPa составляет  $\cong 11\%$ , а уменьшение расщепления слоя (CuO) равно  $\cong 15\%$  (рис. 1, a, b); для сравнения заметим, что изменение периодов решетки составляет  $\Delta a/a = -1.2\%$ ,  $\Delta b/b = -0.4\%$ ,  $\Delta c/c = -1.4\%$ . Будем считать, что заряд слоев иттрия равен +3, а слоев (BaO) — нулю, так что с давлением изменяются только заряд резервуара (CuO)  $q_r$  и заряд проводящего слоя (CuO<sub>2</sub>)  $q_c$ . В этом случае уравнения, определяющие заряды  $q_c$  и  $q_r$  имеют вид

$$q_r + q_c = -1.5, \quad (2)$$

$$q_r - q_c = Q. \quad (3)$$

Выражение (2) есть условие электронейтральности, (3) — определение  $Q$ . Расщепление  $\Delta$  с давлением уменьшается от 0.28 до 0.25 Å, так что вычисленный из (2), (3) заряд слоя (CuO<sub>2</sub>) возрастает от -1.409 до -1.344 (рис. 1, c); другими словами, при давлении до 4.5 GPa в эти слои переходит заряд  $\Delta q_c = +0.06$ . Эта величина в несколько раз превышает ошибку в определении зарядов.

3. Купраты ртути HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>n-1</sub>Cu<sub>n</sub>O<sub>2n+2</sub>. Для них условия, связывающие заряды, имеют вид

$$q_r + q_c = -2(n-1), \quad (4)$$

$$q_r - q_c = Q \quad (5)$$

Исследованы три первых члена ряда. В купрате с  $n = 2$  уменьшение  $\Delta$  при давлении до 3 GPa достигает  $\cong 13\%$  [6,7] (рис. 2, a), в то же время уменьшение периодов  $a$  и  $c$  составляет 1.5 и 2.5%. Указанное уменьшение  $\Delta$  в соответствии с (4), (5) означает, что в слои (CuO<sub>2</sub>) при воздействии давления переходит заряд  $\Delta q_c = +0.10$ . В других купратах ртути изменение расщепления слоев (BaO) значительно слабее

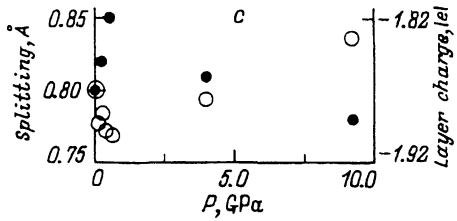
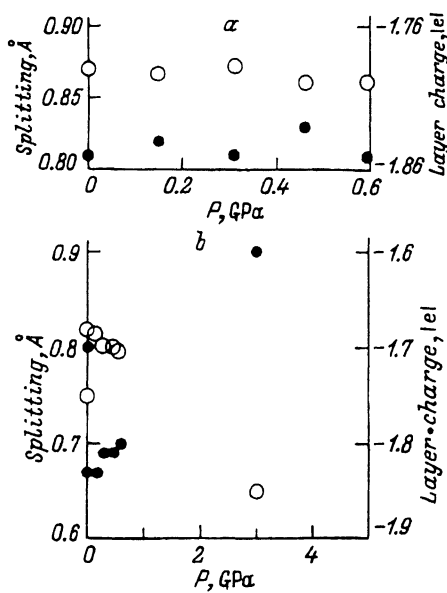


Рис. 2. Зависимость расщепления слое (BaO) (светлые кружки) и заряда слоев (CuO<sub>2</sub>) (темные кружки) в Hg1201 (a), Hg1212 (b) и Hg1223 (c) от давления.

(рис. 2, b, c) [6], причем не исключено, что при  $n = 3$  оно немонотонно, а при  $n = 1$  почти не выходит за пределы ошибки. На основе этих данных можно лишь утверждать, что во всех изученных ртутных купратах под воздействием давления в слое (CuO<sub>2</sub>) переходит положительный заряд.

4. YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub>. Исследованы купраты двух составов: с  $y = 0.07$  и  $0.40$  [3]. При давлениях до 0.6 GPa расщепление  $\Delta$  практически не изменяется, но для  $y = 0.40$  имеет место тенденция к монотонному уменьшению с давлением, аналогичная наблюдаемой в купрате ртути с  $n = 1$ . Таким образом, если в изученной области давлений в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> и имеет место межслоевой переход заряда, то только при составе с  $y = 0.40$ .

5. Обсудим полученные результаты. Когда изменение расщепления слоев (BaO) при воздействии давления установлено, возникает вопрос о его соотношении с уменьшением периодов решетке. Симбатовое изменение расщепления слоев (BaO) и периодов указывает на неизменность зарядов соседних слоев. Реально во всех случаях, когда изменение расщепления имеет место, оно больше изменения периодов и совпадает с ним по знаку. Это означает, что сжимаемость слоев (BaO) больше сжимаемости всего кристалла, и является прямым указанием на наличие барического межслоевой перехода заряда в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub>, YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.60</sub>, Hg1201, Hg1212 и Hg1223. Во всех случаях под давлением происходит переход положительного заряда в слое (CuO<sub>2</sub>). Минимальная величина переданного заряда, которая соответствует чувствительности к изменению расщепления слоев (BaO), составляет  $\approx 0.01-0.02$  в расчете на ион меди в слое (CuO<sub>2</sub>).

Наиболее сильное изменение расщепления слоев (BaO) наблюдается в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> (рис. 1) и Hg1212 (рис. 2, b), хотя для второго купрата имеются результаты только при давлении в 3 GPa. Величина межслоевой передачи заряда составляет  $\Delta q_c = +0.06$  в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> при

$P = 4.6$  ГПа. В то же время в Hg<sub>12</sub>I<sub>2</sub>  $\Delta q_c = +0.10$  при  $P = 3$  ГПа. Из этих величин следует, что в расчете на одинаковое давление межслоевая передача заряда в купрате ртути вдвое-втрое сильнее, чем в иттрий-бариевом купрате.

Сжимаемость всех исследованных ВТСП различается не слишком сильно, поэтому при давлениях в несколько гигапаскалей процесс межслоевой передачи заряда в них должен будет проявляться в значительном изменении  $\Delta$  (ВаО). Проведение таких экспериментов способствовало бы выявлению различия этого процесса в различных ВТСП под давлением.

Автор благодарен Е.В. Антипову, А.М. Балагурову, А.С. Иванову и В.А. Соменкову за полезные дискуссии.

Работа поддерживается Научным советом по проблеме ВТСП в рамках проекта № 93192.

### Список литературы

- [1] Jorgensen J.D., Veal B.W., Paulikas A.P., Nowicki L.J., Crabtree G.W., Claus H., Kwok W.K. Phys. Rev. **B41**, 1863 (1990).
- [2] Cava R.J., Hewat A.W., Hewat E.A., Battlog B., Maresio M., Rabe K.M., Krajewski J.J., Peck W.E., Jr., Rupp L.W. Physica **C159**, 419 (1990).
- [3] Jorgensen J.D., Shiyou Pei, Lightfoot P., Hinks D.G., Veal B.V., Dabrowski B., Paulikas A.P., Kleb R., Brown I.D. Physica **C171**, 93 (1990).
- [4] Nelmes R.J., Loveday J.S., Kaldis E., Karpinski J. Physica **C172**, 311 (1990).
- [5] Yamada Y., Jorgensen J.D., Shiyou Pei, Lightfoot P., Kodama Y., Matsumoto T., Izumi F. Physica **C173**, 185 (1991).
- [6] Hunter R.A., Jorgensen J.D., Wagner J.L., Radaelli P.G., Hinks D.G., Shaked H., Hitterman R.L., von Dreele R.B. Physica **C221**, 1 (1994).
- [7] Aksenov V.L., Balagurov A.M., Savenko B.N., Glazkov V.P., Goncharenko I.N., Somenkov V.A., Antipov A.E., Putilin S.N., Capponi J.-J. High Press. Res. **14**, 127 (1995).
- [8] Nelmes R.J., Wilding N.B., Hatton P.D., McMagon M.I., Piltz R.O., Caignaert V., Raveau B. Physica **C166**, 329 (1990).
- [9] Шильштейн С.Ш., Иванов А.С., Соменков В.А. СФХТ **7**, 903 (1994).
- [10] Шильштейн С.Ш., Иванов А.С. ФТТ **37**, 11, 3268 (1995).
- [11] Tallon J.L. Physica **C168**, 85 (1990).