

- [1] Гапонов А.В., Миллер М.А. // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. В. 2. С. 242-243.
- [2] Геккер И.Р. Взаимодействие сильных электромагнитных волн с плазмой. М.: Атомиздат, 1979. 281 с.
- [3] Дзергач А.И. В кн.: Высокочастотные устройства ускорителей заряженных частиц. М.: РИАН. 1977. Вып. 28, С. 151-156.
- [4] Дзергач А.И., Краснопольский В.А., Осипова С.В. В кн.: Тяжелоионные ускорители. М.: РИАН. 1980. В. 36. С. 114-123.
- [5] Голант В.Е., Жилинский А.И., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы. М.: Атомиздат, 1977. 384 с.

Московский радиотехнический институт АН СССР

Поступило в Редакцию  
4 мая 1989 г.

В окончательной редакции  
21 ноября 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 23

12 декабря 1989 г.

ОБ.4; 11

## ПРОЦЕСС РАДИАЦИОННОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В $YBa_2Cu_3O_7$

В.В. Кирсанов, Н.Н. Мусин

Результаты исследований по воздействию облучения на высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) [см., например, 1-3] показали сильную чувствительность сверхпроводящих свойств ВТСП к наличию радиационных дефектов в них. С целью изучения деталей механизма дефектообразования в ВТСП было исследовано развитие цепочек ион-ионных соударений методом молекулярной динамики.

Вычислительный эксперимент проводился на модельном кристаллите, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда и содержащем 189 ионов. Для описания взаимодействия между ионами использовался парный потенциал, обеспечивающий минимум потенциальной энергии кристаллита при заданных параметрах решетки и координатах ионов в элементарной ячейке [4].

Наибольший интерес при исследовании цепочек соударений в  $YBa_2Cu_3O_7$  представляют ряды ионов  $Cu-O$ , т.к. направления вдоль рядов  $Cu-O$  являются наиболее плотноупакованными, а, следовательно, нужно ожидать, что фокусоны и краудионы будут распространяться по этим атомным рядам. Далее, именно с наличием  $Cu-O$

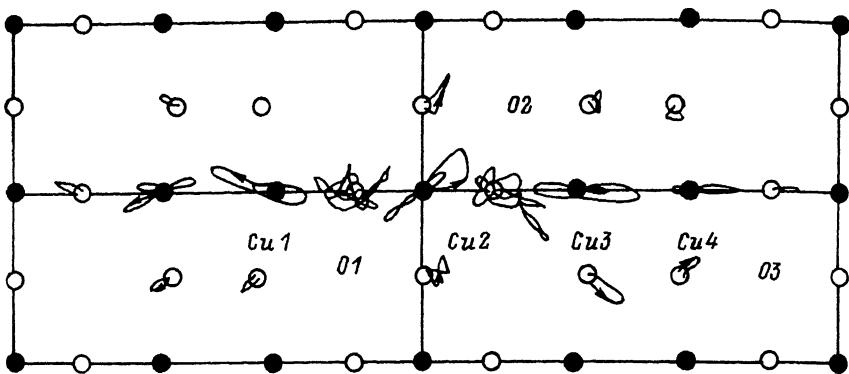


Рис. 1. Динамика цепочки соударений в плоскости (010).  
 Обозначения на рисунке: 1 - ион O, 2 - ион Cu, ПВА - ион кислорода O1.  $E_{\text{пва}} = 25.9$  эВ, угол вылета -  $4.3^\circ$  к оси цепочки. Cu1, Cu2, Cu3, Cu4, O1, O2, O3 - различные ионы цепочки.

плоскостей и Cu-O цепочек сейчас связывают высокотемпературные сверхпроводящие свойства  $YBa_2Cu_3O_7$ . Кроме того, четырехкратное различие в массах меди и кислорода делает поведение цепочки непредсказуемым. Ниже приводятся результаты ЭВМ-моделирования передачи энергии по ряду ионов Cu-O в направлении [001].

Рассматривалась картина развития цепочек соударений в плоскостях (100) и (010). На рис. 1 представлена картина развития цепочки соударений (без образования дефектов) в плоскости (010). На рис. 2 представлена картина развития цепочки соударений (с образованием дефектов) в плоскости (100).

ЭВМ-эксперимент выявил несколько особенностей распространения цепочек соударений в данном направлении. Наблюдаются сильные колебания ионов кислорода около своих узлов. Ионы кислорода испытывают напоминающие тепловые (только большие по амплитуде) колебания вокруг положения равновесия (O1, O2 на рис. 1, O1, O2 на рис. 2). Эти колебания приводят даже к зарождению вторичной цепочки соударений в направлении, противоположном направлению распространения основной цепочки (Cu1 на рис. 1). Такое поведение ионов кислорода можно связать с резким отличием в массах ионов (массы Ba, Y, Cu и O соотносятся как 8.6 : 5.6 : 4 : 1).

Кроме того, в цепочках Cu-O отмечена фокусировка передаваемого импульса. Но характер фокусировки не совсем обычен. Начальная величина угла вылета изменяется по мере ускорения ионов,

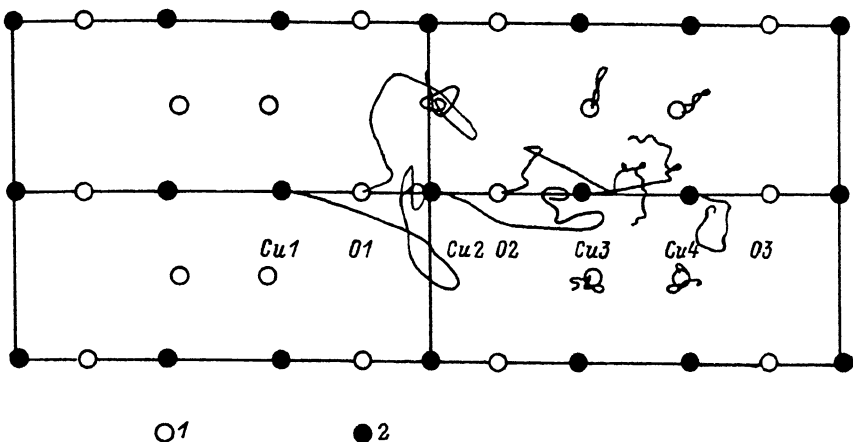


Рис. 2. Динамика цепочки соударений в плоскости (100). Обозначения аналогичны рис. 1. ПВА - ион меди  $Cu1$ .  $E_{ПВА} = 42.2$  эВ, угол вылета -  $6.3^\circ$  к оси цепочки.

причем иногда происходит смена знака направления вылета. В таких условиях, на наш взгляд, нецелесообразно определять параметр фокусировки. Можно лишь сделать замечание об общей тенденции к уменьшению абсолютной величины начального угла вылета. Данная аномалия, судя по всему, возникает из-за дальнего действия кулоновского потенциала, вследствие чего ион цепочки чувствует влияние всех предыдущих ионов.

Наблюдается достаточно быстрое рассеяние энергии при соударениях в цепочке  $Cu-O$ . Так, при энергии ПВА (ион кислорода), равной 25.9 эВ, ионы цепочки имеют следующие максимальные кинетические энергии: 13.9, 4.8, 4.9, 1.7 эВ.

При соответствующих энергиях ПВА имеет место образование точечных дефектов. Пример цепочки с образованием точечных дефектов показан на рис. 2. Образование дефектов при распространении данной цепочки происходит специфичным образом. Во время своего движения ионы меди, обходя узлы ионов кислорода, замещают другие ионы меди. Так,  $Cu1$  перескакивает на узел иона  $Cu2$ , который в свою очередь попадает на узел иона  $Cu3$ . Во время этого процесса происходит выброс ионов кислорода  $O1$  и  $O2$ , а также иона меди  $Cu3$  в межузельное положение.

Особо следует обратить внимание на выброс ионов кислорода. Из экспериментов [5] известно, что во время облучения происходит увеличение заселенности позиций  $O(5)$  (обозначение из работы [5]) и некоторое уменьшение общего количества упорядоченного кислорода. Выбросы иона  $O1$  на позицию  $O(5)$ , а иона  $O2$  в межузельное положение дают возможное объяснение этим наблюдениям.

В результате прохождения такой цепочки происходит образование комплексов дефектов  $V_{Cu} + V_O, I_{Cu} + I_O$  (где  $V$  и  $I$  обозначают вакансию и межузельный атом соответственно), а также кислородной вакансии и межузельного кислорода. Вакансионный комплекс располагается в начале цепочки и включает узлы первоначально занятые ионами  $Cu1$  и  $O1$ . Комплекс из межузлий гантельного типа заключен в области между ионами  $Y$  в конце цепочки. Вакантным оказался также узел первоначально занятый  $O2$ , а ион  $O1$  переместился в позицию  $O(5)$ , образовав межузельный дефект. Такое скопление близко расположенных ионов оказывается устойчивым. Пороговая энергия смещения, при которой начинается образование дефектов зависит от плоскости распространения цепочки и типа иона, служащего ПВА. Например, для цепочки, изображенной на рис. 1, она равна 32 эВ.

Таким образом, изучены особенности распространения цепочек  $Cu-O$  соударений в направлении  $[001]$  для кристалла  $YBa_2Cu_3O_7$ . Получены величины пороговой энергии смещения и конфигурации дефектов в данных цепочках.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] З а й ц е в Л.Н. В кн.: Моделирование на ЭВМ процессов радиационных и других воздействий на кристаллы, Л.: Наука, 1989. С. 55-56.
- [2] А н т о н е н к о С.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. В. 9. С. 362-364.
- [3] А н т о н е н к о С.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. В. 5. С. 260-263.
- [4] С h a r p l o t S.L. // Phys. Rev. 1988. V. 37. N 13. P. 7435-7442.
- [5] А л е к с а ш и н Б.А., В о р о н и н В.И., В е р х о в с к и й С.В. и др. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. В. 2. С. 678-697.

Калининский  
политехнический институт

Поступило в Редакцию  
29 июня 1989 г.  
В окончательной редакции  
21 ноября 1989 г.