

## Влияние особенностей сил межатомного взаимодействия на динамику решетки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (метод молекулярной динамики)

© Е.Б. Долгушева, В.Г. Чудинов, А.Г. Чирков

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук,  
426001 Ижевск, Россия

E-mail: chud@fti.udmurtia.su

(Поступила в Редакцию 27 августа 1998 г.  
В окончательной редакции 10 января 1999 г.)

Методом молекулярной динамики исследованы динамические свойства высокотемпературного сверхпроводника  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Показано, что также как и в системе  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , из-за наличия сильного ангармонизма и существенного различия в силах межатомного взаимодействия около зарядовых дефектов  $\text{Ba}^{4+}$  в плоскостях  $\text{CuO}_2$  и  $\text{CuO}$  возникают локальные "горячие" области, где средняя кинетическая энергия колебаний атомов кислорода достигает  $\sim 0.5$  eV. Все другие типы дефектов: вакансии по кислороду, по меди, замещения атомов и зарядовые дефекты к таким эффектам не приводят.

В инфракрасных спектрах рассеяния света во всех высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) обнаружены в сверхпроводящей фазе пики с энергией ( $\sim 0.4$  eV в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [1],  $\sim 0.7$  eV — в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  [2],  $0.8$ – $1.2$  eV — для  $\text{BiSr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_y$  ( $n = 1, 2, 3$ ) [3]). Обращает на себя внимание корреляция этих пиков с температурой перехода в сверхпроводящее состояние ( $T_c$ ): чем больше энергия пика, тем выше  $T_c$ . Природа этих пиков недостаточно ясна. Большинство авторов связывают их с возбуждениями в электронной подсистеме, с наличием поляронов. Но в этом случае при изменении плотности носителей тока должна изменяться, согласно модели Друде, частота этих колебаний  $\omega \sim n^{1/2}$ , где  $n$  — число носителей [1]. Однако этого не наблюдается, а положение пиков остается в пределах ошибки неизменным. Тем не менее некоторые теоретические работы показывают возможность объяснения данного факта, считая, что эти поглощения обусловлены межзонными электронными переходами [4]. Попыток отождествить их с колебаниями кристаллической решетки не было, а обнаружить их экспериментально с помощью рассеяния медленных нейтронов сложно методически.

Имеются эксперименты, которые косвенно указывают на существование в этих системах локальных высокочастотных колебаний. Как известно, температура Дебая в лантановых соединениях  $\sim 400$  K. Однако в работе [5] при измерении методом нейтронного рассеяния парциальной кинетической энергии атомов в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  обнаружили, что температура Дебая для кислорода  $1400$  K ( $120$  meV),  $1500$  K соответственно в данных соединениях. Авторы этой работы считают, что незарегистрированные высокочастотные колебания могут играть важную роль в механизме ВТСП. При комнатной температуре теплоемкость соединений  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  достигает лишь  $\sim 85\%$  от максимального значения при классическом пределе  $3Nk$  [6], что также может указывать на существование высокочастотных мод колебаний решеток, не дающих вклада в теплоемкость при комнатных температурах.

В экспериментах по комбинационному рассеянию света в соединениях  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  наблюдаются полосы в области  $100$ – $150$  meV [7]. Авторы связывают их с особенностями кристаллической структуры и фононных спектров этих систем. Также обнаружены фононные особенности в туннельных спектрах до  $\sim 180$  meV в висмутовых соединениях, в которых исследовались электрические характеристики точечных туннельных контактов [8]. Однозначный ответ о природе этих особенностей может дать только прямой эксперимент по неупругому рассеянию медленных нейтронов, поскольку разнообразие свойств и сложность структур ВТСП затрудняют интерпретацию экспериментальных результатов.

В этом плане особый интерес представляет метод молекулярной динамики (ММД). Использование ММД позволяет определить как структурные, так и динамические характеристики твердых тел. Он требует знания кристаллической структуры и потенциалов парного взаимодействия (ППВ). Работы, выполненные с помощью этого метода, в основном исходят из того, что все связи в моделируемых ВТСП носят ионный характер [9–11]. Нам же кажется, что такой подход некорректен, так как он не учитывает реальных свойств медьсодержащих ВТСП. Все ВТСП этого класса обладают слоистой структурой, в которых слои  $\text{CuO}$  с ярко выраженной "металлической" связью чередуются с "диэлектрическими". Характерная особенность наших потенциалов заключалась в выполнении этого требования. Расчеты показали [12], что в слоях  $\text{CuO}$  глубины ям потенциалов по порядку величины сравнимы с обычными металлическими, а в поперечном направлении из-за слабой экранировки они близки к ионным. В настоящей работе использованы модельные потенциалы, рассчитанные по псевдопотенциальной схеме, с использованием формфактора Хейне–Абаренкова–Анималу с обменно-корреляционными поправками Шоу [13]. Подробно построение их описано в работе [12].

В работах [14–16] для ангармоничной системы  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  показано, что при использовании потенциалов, отражающих физические свойства слоистых структур, появляются локальные высокочастотные колебания с энергией  $\sim 0.4 \text{ eV}$  атомов кислорода в слое  $\text{CuO}_2$  вблизи примесных атомов Sr. При малых концентрациях Sr происходит пространственное перераспределение кинетической энергии атомов системы. Образуются "горячие" области и "холодная" матрица, по которой в принципе может протекать сверхпроводящий ток. Эта картина была стационарна, не зависела от начальных условий и не изменялась, даже если система выдерживалась до  $10^{-9} \text{ s}$ , что в  $\sim 1000$  раз больше времени релаксации. Возникает вопрос, насколько общий характер имеют эти результаты для других медьсодержащих ВТСП. Цель данной работы — исследование влияния особенностей сил межатомного взаимодействия на динамику решетки другого высокотемпературного сверхпроводника  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Эта система также проявляет сильно ангармонические свойства [17].

## 1. Методика эксперимента

Элементарная ячейка моделируемого кристаллита имеет параметры:  $a = 0.382$ ,  $b = 0.388$ ,  $c = 1.168 \text{ nm}$ . Из-за ограниченных возможностей программы и ЭВМ, сложности кристаллической решетки моделирование проводилось в одном случае для пяти слоев:  $\text{BaO-CuO}_2\text{-Y-CuO}_2\text{-BaO}$  и во втором случае — для трех слоев:  $\text{BaO-CuO-BaO}$ . Слои BaO жестко закреплялись, а вдоль осей X и Y использовались циклические граничные условия. Модельный кристаллит содержал в первом случае около 700 подвижных атомов, во втором — около 800 подвижных атомов. В исходном состоянии валентности взяты:  $\text{Y}^{3+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{O}^{2-}$  (в слое BaO) и  $\text{O}^{1-}$  (в слое  $\text{CuO}_2$ ). В качестве дефектов были исследованы  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{Cu}^{1+}$ ,  $\text{Cu}^{3+}$ , предположения о связи которых с явлением ВТСП неоднократно высказывались, вакансии меди и кислорода (в слое  $\text{CuO}_2$ ) и зарядовый дефект  $\text{Ba}^{4+}$  (в слое BaO, замена Ba на Y и Y на Ba). В случае цепочек CuO валентности в исходном состоянии взяты:  $\text{Cu}^{1+}$ ,  $\text{O}^{1-}$  (в слое CuO) и  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{O}^{2-}$  (в слое BaO). В качестве дефектов в цепочках были исследованы вакансии кислорода и меди, зарядовые дефекты:  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{3+}$  (в цепочках CuO) и  $\text{Ba}^{4+}$  (в слое BaO).

Процедура формирования кристаллита состояла из следующих операций: трансляция атомов в ячейке, задание потенциалов и сил взаимодействия, минимизация потенциальной энергии, заключающейся в подборе равновесного размера ячейки, задание начальных расчетных условий. После этого проводилось уточнение положения атомов с помощью релаксации и выдержки кристаллита в течение  $\sim 10^{-12} \text{ s}$  при  $T \approx 0$  без внешнего влияния на систему. Если структура оставалась стабильной в рассчитываемое время, то вычислялись динамические характеристики. Постоянная решетки воспроизводилась с точностью до 5%.

При расчете потенциалов мы учитываем, что не вся ячейка является "металлической", а только слои  $\text{CuO}_2$  и CuO и, кроме того, известно, что плотность электронов в этой системе составляет около одного электрона на элементарную ячейку. Все они располагаются в узком ( $\sim r_b$  — радиуса Бора) слое. В работах по расчетам электронной структуры [18] и исследовании поверхности Ферми методами фотоэлектронной спектроскопии [19] показано, что плотность электронов на уровне Ферми существует как в слоях  $\text{CuO}_2$ , так и в цепочках CuO в соотношении  $\sim 0.7$  и  $\sim 0.3$ . Все ППВ в этих слоях имеют глубину потенциальной ямы порядка  $\sim 0.1 \text{ eV}$ . Потенциалы между "металлическими" и "диэлектрическими" слоями порядка нескольких eV. Глубина потенциала  $\text{Ba}^{2+}\text{-O}^{1-}$  составляет  $\sim 6 \text{ eV}$ , а  $\text{Ba}^{2+}\text{-Cu}^{2+} \sim 3 \text{ eV}$ . Потенциалы с Ba имеют глубину ямы намного больше, чем все остальные ППВ этой системы. Это связано, по-видимому, с тем, что Ba имеет большой ионный радиус, который в свою очередь коррелирует с модельным радиусом. Модельный радиус является одним из параметров для расчета ППВ в методе Хейне–Абаренкова–Анималу. К таким атомам, кроме Ba, относятся Sr, Ca, которые также присутствуют во всех медьсодержащих ВТСП.

Температура в систему вводилась обычным для ММД способом: всем атомам сообщалась равная по величине, но случайная по направлению скорость с последующим приведением в равновесие. Система считалась приведенной в равновесие, если функция распределения по скоростям не изменяется со временем и основные параметры системы (кинетическая энергия, потенциальная энергия, полная энергия, минимальное расстояние между атомами и т.п.) флуктуируют за счет конечных размеров системы около некоторого среднего значения, которое не меняется со временем  $\sim 10^{-11} \text{ s}$ .

Для анализа динамических свойств рассчитывалась плотность колебательных состояний  $G(\omega)$ , как Фурье-образ автокорреляционной функции  $\gamma(\tau)$  [20]

$$G(\omega) = \int_0^{\infty} \gamma(\tau) \exp(-i\omega\tau) d\tau, \quad (1)$$

где

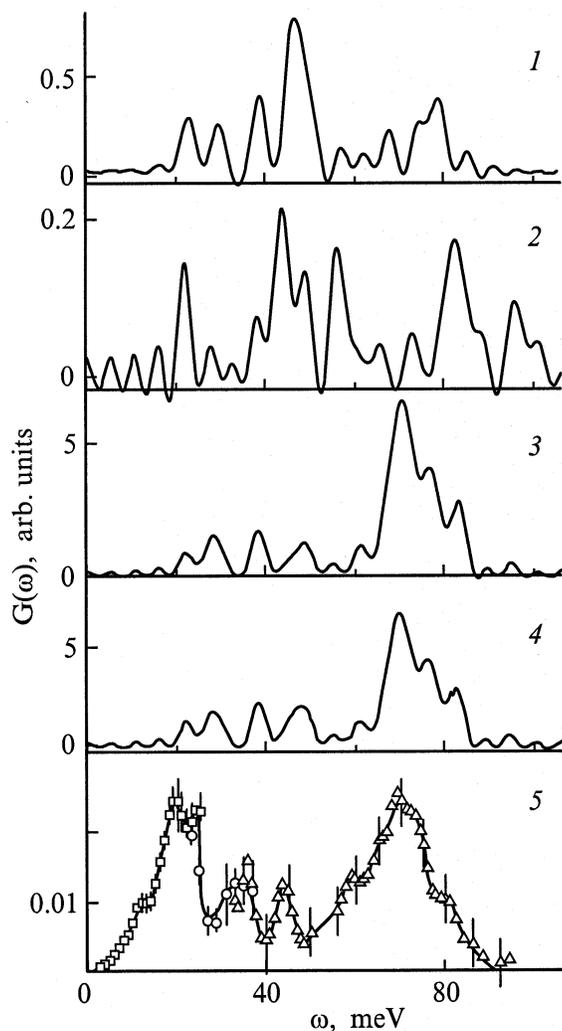
$$\gamma(\tau) = \sum_i \langle \mathbf{v}_i(\tau) \mathbf{v}_i(0) \rangle / v_i^2(0)$$

— автокорреляционная функция,  $\mathbf{v}_i(\tau)$  — вектор скорости атома  $i$  в момент времени  $\tau$ ,  $\langle \dots \rangle$  — усреднение по различным промежуткам времени.

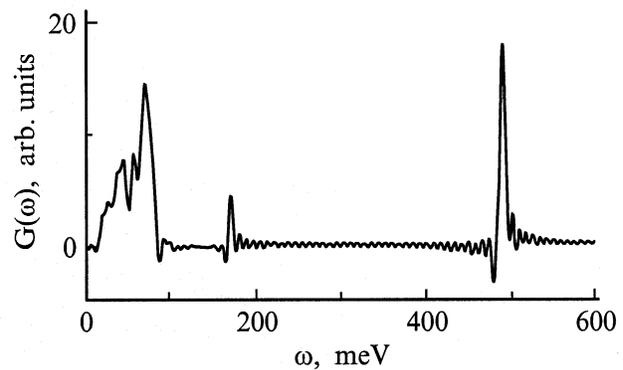
## 2. Результаты расчетов и обсуждение

2.1. Динамика слоя  $\text{CuO}_2$ . На рис. 1 изображены парциальные (Cu, Y, O) и полная плотности колебательных состояний, рассчитанные для слоя  $\text{CuO}_2$  при  $T = 90 \text{ K}$ . Отрицательные значения и малые осцилляции обусловлены погрешностью расчета и конечными размерами кристаллита. Информация о плотности

колебательных состояний (ПКС) по иттриевой системе представлена в работах [21–24] с помощью метода неупругого рассеяния нейтронов. Следует отметить, что в общих чертах результаты различных работ сходятся. Граничная частота ПКС во всех работах лежит в области 100 meV, а также положения основных пиков практически совпадают. На рис. 1 (5) для сравнения приведена экспериментальная ПКС из работы [21]. Поскольку наши результаты получены только для трех подвижных слоев, то их нельзя непосредственно сравнивать с экспериментом, однако качественное согласие имеется. Наличие границы фононного спектра  $\sim 100$  meV и пиков в области 60–90 meV, обусловленных атомами кислорода, согласуется с экспериментом. Медные пики в основном находятся в области 20–50 и 75–80 meV. Вклад в  $G(\omega)$  от атомов иттрия имеется в диапазоне энергий 20–100 meV. Экспериментальные пики  $\sim 12$ –15 meV, вероятно, обусловлены тяжелыми атомами Ba.



**Рис. 1.** Плотности колебательных состояний: парциальные Cu — (1), Y — (2), O — (3) и полная — (4) для слоя Cu–O<sub>2</sub> при  $T = 90$  К без дефектов. Эксперимент [15] по неупругому нейтронному рассеянию для  $YBa_2Cu_3O_7$  — (5).

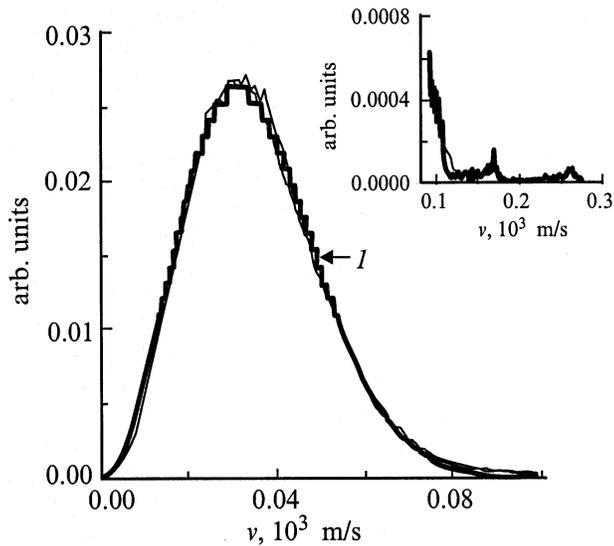


**Рис. 2.** Плотность колебательных состояний для слоя  $CuO_2$  при  $T = 90$  К и зарядовом дефекте  $Ba^{4+}$  (5%).

В работе [25], было высказано предположение о возможности появления зарядового дефекта  $Ba^{4+}$  при обратной окислительно-восстановительной реакции. Прямые эксперименты методом рентгеноэлектронной спектроскопии с высоким разрешением позволили обнаружить такое валентное состояние Ba [26].  $Ba^{4+}$  появлялся при переходе в сверхпроводящее состояние, сопровождающегося структурной деформацией решетки. Качественное поведение потенциалов  $Ba^{4+}$  с атомами кислорода и меди из слоя  $CuO_2$  аналогично поведению ППВ со  $Sr^{2+}$  в лантановой системе. Парный потенциал  $Ba^{4+}-Cu^{2+}$  характеризуется глубиной ямы 8 eV, а  $Ba^{4+}-O^{1-}$  — 36 eV.

Нами было введено в слой BaO 5%  $Ba^{4+}$ . Резкое различие в характере ППВ привело к появлению локальных колебаний с энергией  $\sim 0.17$ – $0.18$  eV и с энергией  $\sim 0.5$  eV. Плотность колебательных состояний для слоя  $CuO_2$  при  $T = 90$  К и с дефектами  $Ba^{4+}$  (5%) представлена на рис. 2. Одновременно наблюдалось перераспределение кинетической энергии в системе. Появлялись "горячие" области и "холодная" матрица аналогично наблюдаемой нами ранее в лантановой системе [14]. Была смоделирована также ситуация с одновременным присутствием ионов  $Ba^{4+}$  и 10% ионов  $Cu^{3+}$  в слое  $CuO_2$ . Это привело к исчезновению пика на  $\sim 0.17$ – $0.18$  eV, при этом пик на 0.5 eV сохранялся. Потенциалы с  $Cu^{3+}$  имеют глубину потенциальной ямы примерно в 3–4 раза глубже, чем соответствующие ППВ с  $Cu^{2+}$ . Исследование динамики решетки  $CuO_2$  слоя при наличии всех перечисленных выше дефектов, кроме  $Ba^{4+}$ , не привели к появлению локальных высокочастотных колебаний.

Большое внимание уделялось контролю состояния системы, так как все физические характеристики можно вычислять только при достижении системой стационарного состояния. Время достижения стационарного состояния, определяемое временем "затухания" автокорреляционной функции, для нашей конкретной системы составляет  $\sim 4 \cdot 10^{-13}$  s. В расчетах же проходили времена всегда намного больше  $\sim 10^{-11}$  s, после чего



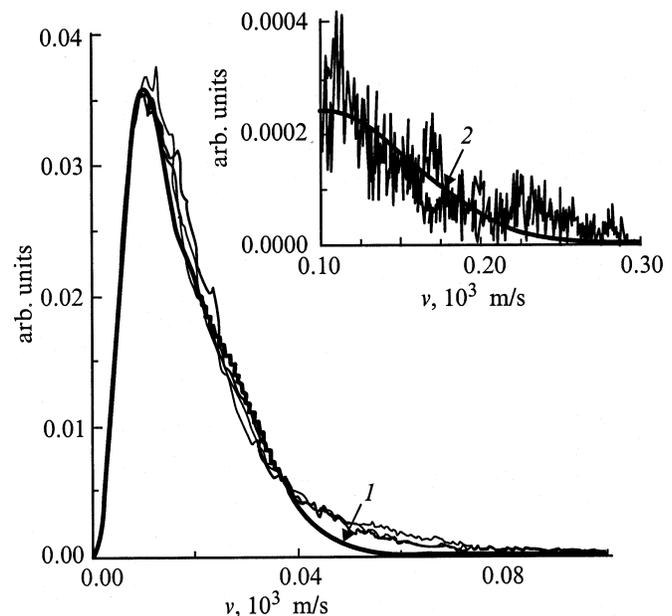
**Рис. 3.** Функции распределения по скоростям атомов кислорода слоя  $\text{CuO}_2$  для времен  $\tau_1 = 8 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_2 = 9 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_3 = 10^{-10} \text{ s}$  (тонкие кривые) при  $T = 90 \text{ K}$  и наличии дефектов  $\text{Ba}^{4+}$  (5%). Теоретическое распределение: жирная кривая 1 — при  $T = T_1 A_1 + T_2 A_2$ , где  $T_1 = 85$ ,  $T_2 = 90 \text{ K}$ ,  $A_1 = 0.5$ ,  $A_2 = 0.45$ .

вычислялись функции распределения по скоростям; если они не изменялись со временем (в пределах ошибки), то рассчитывали ПКС. В исходном состоянии и при наличии всех исследуемых дефектов, кроме  $\text{Ba}^{4+}$ , функция распределения по скоростям описывается распределением Максвелла. В случае же присутствия в системе ионов  $\text{Ba}^{4+}$  наблюдаются заметные отклонения от распределения Максвелла в высокоэнергетической области, особенно для атомов кислорода. Для грубой оценки температуры "горячей" и "холодной" областей использовано разложение по распределениям Максвелла с весовыми коэффициентами [27]. На рис. 3 приведены функции распределения по скоростям для времен  $\tau_1 = 8 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_2 = 9 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_3 = 10^{-10} \text{ s}$  при  $T = 90 \text{ K}$ . Низкоэнергетическая часть распределения описывается двумя распределениями Максвелла при  $T_1 = 85 \text{ K}$  с весовым коэффициентом 0.5 и  $T_2 = 90 \text{ K}$  с весовым коэффициентом 0.45 (кривая 1 на рис. 3), а в области высоких энергий имеются два пика, соответствующие температурам  $\sim 2600$  и  $\sim 5700 \text{ K}$  (вставка на рис. 3). Отклонения от распределения Максвелла в медной и иттриевой подсистемах незначительны. Атомы кислорода с большими энергиями находились вблизи ионов  $\text{Ba}^{4+}$ . Их средняя кинетическая энергия в 15–20 раз больше, чем в остальной части матрицы. Эффект существенно меньше, чем в лантановой системе, но идентичен ему с точки зрения физического содержания.

2.2. Динамика цепочек  $\text{CuO}$ . Сходным образом были рассчитаны парциальные ( $\text{Cu}$ ,  $\text{O}$ ) и полная плотности колебательных состояний для цепочек  $\text{CuO}$  при  $T = 90 \text{ K}$  без каких-либо дефектов. Пики на 30

и 65–70 meV обусловлены колебаниями атомов кислорода, а пики на 40, 50 meV — колебаниями атомов меди. При внесении в плоскость  $\text{BaO}$  зарядовых дефектов  $\text{Ba}^{4+}$  (5%) атомы меди и кислорода, расположенные вблизи дефекта сдвигаются из положения равновесия  $\sim$  на 10–15% по направлению к дефекту  $\text{Ba}^{4+}$ . В плотности колебательных состояний появляются локальные пики с энергией  $\sim 0.2$  и  $\sim 0.52 \text{ eV}$ , обусловленные колебаниями атомов кислорода.

Также как и в плоскости  $\text{CuO}_2$ , в цепочках  $\text{CuO}$  в исходном состоянии и со всеми дефектами, кроме  $\text{Ba}^{4+}$ , функции распределения по скоростям хорошо описываются соответствующими распределениями Максвелла. При наличии  $\text{Ba}^{4+}$  в цепочках отличие функций распределения по скоростям от распределения Максвелла очень сильное и гораздо большее, чем в плоскости  $\text{CuO}_2$ . На рис. 4 приведены функции распределения по скоростям при  $T = 90 \text{ K}$  для атомов кислорода на разных временных шагах. Низкоэнергетическую часть для атомов кислорода можно описать двумя распределениями Максвелла при  $T_1 = 8 \text{ K}$  (вес — 0.4) и  $T_2 = 45 \text{ K}$  (вес — 0.55) (кривая 1 на рис. 4), а высокоэнергетическую — распределением Максвелла при  $T = 1000 \text{ K}$  (кривая 2 на вставке к рис. 4). Функция распределения по скоростям атомов меди отличается от распределения Максвелла гораздо существеннее, чем в слое  $\text{CuO}_2$ . Высокоэнергетические атомы в цепочках  $\text{CuO}$  находятся, как и в слое  $\text{CuO}_2$ , в ближайшем окружении  $\text{Ba}^{4+}$  и образуют "горячие" области, в которых средняя кинетическая энергия атомов в  $\sim 15$ –20 раз больше, чем в матрице.



**Рис. 4.** Функции распределения по скоростям атомов кислорода цепочек  $\text{CuO}$  для времен  $\tau_1 = 4 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_2 = 5 \cdot 10^{-11} \text{ s}$ ,  $\tau_3 = 6 \cdot 10^{-11} \text{ s}$  (тонкие кривые) при  $T = 90 \text{ K}$  и наличии дефектов  $\text{Ba}^{4+}$  (5%). Теоретическое распределение: жирная кривая 1 — при  $T = T_1 A_1 + T_2 A_2$ , где  $T_1 = 8$ ,  $T_2 = 45 \text{ K}$ ,  $A_1 = 0.4$ ,  $A_2 = 0.55$ , жирная кривая 2 — при  $T = 1000 \text{ K}$ .

При замещении в модельном эксперименте всех ионов  $Ba^{2+}$  на  $Ba^{4+}$  распределение по скоростям вновь оказывалось близким к распределению Максвелла, но при этом локальные высокочастотные пики (ЛВК) в ПКС сохранились, а "горячие" точки "блуждали" по всей плоскости со временем жизни  $\sim 10^{-12}$  с.

Также как и в плоскости  $CuO_2$ , мы исследовали влияние различных точечных дефектов (вакансии кислорода, меди, замещение  $Cu^{1+}$  на  $Cu^{2+}$  и  $Cu^{3+}$ ) на динамику цепочек  $CuO$ , но ЛВК появлялись только при зарядовом дефекте  $Ba^{4+}$ .

В работе [12] отмечалось, что для соответствующих слоев ППВ в лантановой и в иттриевой системах очень близки и по характеру, и по порядку величин. В лантановой системе потенциал Sr–O имел существенно глубокий минимум ( $\sim 30$  eV), что привело к появлению ЛВК атомов кислорода, в иттриевой системе такую роль выполняет зарядовый дефект  $Ba^{4+}$ , потенциал которого с кислородом также имеет очень глубокую яму (36 eV). И в том и в другом случае около дефектов, имеющих глубокий и ангармоничный ППВ ( $Sr^{3+}$ ,  $Ba^{4+}$ ), возникают ЛВК атомов кислорода с большой энергией ( $\sim 0.4$ – $0.5$  eV). Причем средняя кинетическая энергия этих атомов существенно выше, чем в матрице, т.е. возникают "горячие" области. Эффект "горячих" точек наблюдается только при отклонении функции распределения по скоростям от распределения Максвелла. Поэтому можно сказать, что динамика кристаллической решетки проводящих слоев  $CuO_2$  и  $CuO$  как в лантановой, так и в иттриевой системах носит общий характер.

Следует отметить, что в таллиевых и висмутовых системах экспериментально показано [28–30], что таллий содержится в двух валентных состояниях  $Tl^{1+}$  и  $Tl^{2+}$ , а в висмутовых системах  $Pb$  имеет валентности  $Pb^{3+}$  и  $Pb^{5+}$ . Возможно, эта разница зарядов  $Pb(Pb)$  наводит в плоскостях  $BaO$  такие же зарядовые дефекты как в лантановой и иттриевой системах. С точки зрения наших результатов, эти дефекты должны иметь резко отличный потенциал взаимодействия с кислородом, а такой потенциал характерен для атомов с большим ионным радиусом (Sr, Ba, Ca).

Таким образом, методом молекулярной динамики показано, что определенные виды дефектов ( $Ba^{4+}$ ) в модели кристаллической решетки системы  $YBa_2Cu_3O_7$  приводят к возбуждению ЛВК с энергией  $\sim 0.5$  eV. Ответственными за появление ЛВК, так же как и в лантановой системе, являются ионы с большим ионным радиусом, потенциал которых необычайно глубок. В лантановой системе это были атомы Sr, а в иттриевой системе таким является зарядовый дефект  $Ba^{4+}$ . Таким образом, в иттриевой системе может быть в принципе реализована такая же ситуация, как в лантановой системе, при которой основная доля энергии тепловых колебаний будет сосредоточена на сравнительно малых (0.5 nm) участках медьсодержащих плоскостей вблизи дефекта.

## Список литературы

- [1] S. Tayima, S. Uchida, S. Tanaka, S. Kanbe, K. Kitazawa, K. Fueki. *Jap. J. Appl. Phys.* **26**, 4, L432 (1987).
- [2] H.L. Dewing, E.K.H. Solje, K. Scott, A.P. Mackenzie. *J. Phys.: Condens. Mater* **4**, L109 (1992).
- [3] A. Macda, M. Hase, I. Tsukada, K. Noda. *Phys. Rev.* **B41**, 10, 6418 (1990).
- [4] В.М. Локтев. *СФХТ* **6**, 11–12, 1972 (1993).
- [5] S. Ikeda, M. Misawa, S. Tomiyosh, M. Omori, T. Suzuki. *Phys. Lett.* **A134**, 3, 191 (1988).
- [6] J.A. Unod, A. Berzinge, D. Cattani, J. Cors, M. Decroux, O. Fisher, P. Genoud, L. Hoffmann, J.L. Jorda, J. Muller, E. Walker. *Jap. J. Appl. Phys.* **26**, Suppl. 26–3, 1119 (1987).
- [7] В.П. Преображенский, В.Д. Климов, Ш.Ш. Набиев, А.П. Осипов, В.П. Ушаков, И.Ю. Арнольд, С.Е. Воинова, Ю.И. Верещагин, Р.С. Ларина, В.И. Ожогин. Проблемы высокотемпературной сверхпроводимости. Ч. 2. АН УрО СССР, Свердловск (1987). С. 34.
- [8] M. Ohachi, D. Shimada, N. Tsuda. *Jap. J. Appl. Phys. Pt 2*, **32**, 28, L251 (1993).
- [9] X. Zhang, C.R.A. Catlow. *Phys. Rev.* **B46**, 1, 457 (1992).
- [10] R.C. Bartzold. *Phys. Rev.* **B38**, 164, 11 304 (1988).
- [11] S.L. Chaplot. *Phys. Rev.* **B42**, 4, 2149 (1990).
- [12] В.Г. Чудинов, Е.Б. Долгушева, А.А. Юрьев. *СФХТ* **4**, 11, 2086 (1991).
- [13] Межчастичное взаимодействие в жидких металлах / Под ред. О.А. Есина. Наука, М. (1979). 195 с.
- [14] В.Г. Чудинов, А.Г. Чирков, Е.Б. Долгушева, В.М. Дядин. *СФХТ* **6**, 1, 204 (1993).
- [15] А.Г. Чирков, В.Г. Чудинов. *СФХТ* **7**, 5, 800 (1994).
- [16] В.Г. Чудинов, А.Г. Чирков. *СФХТ* **8**, 2, 243 (1995).
- [17] Л.М. Волкова, С.А. Полищук, С.А. Магарилл, С.В. Борисов. *СФХТ* **2**, 8, 127 (1989).
- [18] W.E. Pickett. *Rev. Mod. Phys.* **61**, 2, 433 (1989).
- [19] H. Haghghi, J.H. Kaiser, S. Rayner, R.N. West, J.Z. Liu, R. Shelton, R.H. Howell, F. Solal, M.J. Fluss. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3, 382 (1991).
- [20] J.M. Dickey, A. Paskin. *Phys. Rev.* **188**, 3, 1407 (1969).
- [21] J.J. Rhyne, D.A. Neumann, J.A. Gotaas, F. Beech, L. Toth, S. Lawrence, S. Wolf, M. Osofsky, D.U. Gubser. *Phys. Rev.* **B36**, 4, 2294 (1987).
- [22] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, И.А. Черноплеков, И.Э. Грабой, А.Р. Кауль. *СФХТ* **201**, 2, 30 (1988).
- [23] И. Натканец, А.В. Белушкин, Е.А. Горемычкин, Я. Майер, И.Л. Сашин, В.К. Федотов, Р.К. Николаев, Е.Г. Понятовский, Н.С. Сидоров. *Письма в ЖЭТФ* **48**, 3, 166 (1989).
- [24] L. Pintschovius, N. Pyka, W. Reichardt, A.Yu. Rumiantzen, N.L. Mitrofanov, A.S. Ivanov, G. Collin, P. Rougers. *Physica C* **185–189**, 156 (1991).
- [25] Г.П. Костикова, Д.В. Корольков, Ю.П. Костиков. *Докл. РАН. Химия.* **331**, 3, 318 (1993).
- [26] I.N. Shabanova, O.V. Popova, V.I. Kukuev, V.I. Kormilets. *Surf. Rev. Lett.* **5**, 1, 347 (1998).
- [27] Ю.Л. Климонтович. *Статистическая физика.* Наука, М. (1982). С. 158.
- [28] T. Suzuki, M. Nagoshi, Y. Fuhuda, S. Nakajima, M. Kikuchi, Y. Syono, M. Tachiki. *Physica C* **162–164**, 1387 (1989).
- [29] A. Manthiram, M. Paranthaman, J.B. Goodenough. *Physica C* **171**, 135 (1990).
- [30] S. Kambe, T. Matsuoka, M. Takahasi, M. Kawai, T. Kawai. *Phys. Rev.* **B42**, 4, 2669 (1990).