

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРЦИАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ Cu И O В YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub>

*П.П.Паршин, М.Г.Землянов, О.Е.Парфенов, А.А.Чернышев*

В образцах YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,93</sub> и YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,07</sub> с использованием метода изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов, определены парциальные плотности колебательных состояний атомов Cu и O и их изменение с концентрацией кислорода.

Известно, что в керамических купратах с высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние определяющую роль в формировании сверхпроводимости играют атомы Cu и O, образующие в соединениях 1·2·3 Cu1·04 цепочки и Cu2·02·03 плоскости. В связи с этим представляют интерес исследования, направленные на получение информации о парциальных спектрах колебаний атомов Cu и O. Обобщенная плотность колебательных состояний  $\theta(E)$ <sup>1</sup> для YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> была определена из данных по неупрочному рассеянию нейтронов<sup>2-4</sup>. Парциальные плотности колебаний для всех атомов YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> были получены только расчетным путем<sup>4,5</sup> в различных модельных предположениях. Зависимость вероятности неупрочного рассеяния нейтронов от отношения  $\sigma/M$  ( $\sigma$  – сечение рассеяния нейтронов,  $M$  – масса ядра) открывает принципиальную возможность для экспериментального определения парциальных спектров колебаний отдельных элементов. Фактор  $\sigma/M$  для изотопа Cu<sup>65</sup> в два раза больше, чем для естественной смеси изотопов Cu. Следовательно, разница между спектральными распределениями, полученными для двух образцов YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> с указанными изотопными составами, пропорциональна парциальной плотности колебаний атомов Cu<sup>6</sup>. В данной работе, из результатов таких измерений, восстановлены спектры колебаний меди в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,07</sub> и кислорода в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,93</sub> и YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,07</sub>.

Спектральные распределения колебательных состояний определялись с помощью неупрочного рассеяния нейтронов на спектрометре по времени пролета<sup>7</sup>. Эксперименты проводились на керамических образцах при комнатной температуре. Обработка данных измерений, полученных под пятью углами рассеяния в интервале 30°–90°, проводилась в некогерентном приближении с учетом вклада процессов многофононного рассеяния.

Фазовый состав и структура образцов контролировались рентгеноструктурным методом. Состав по кислороду изменялся отжигом в газовой среде с необходимым парциальным давлением кислорода, после чего образец закаливался в струе газообразного гелия<sup>8</sup>.

Парциальный спектр колебаний атомов Cu (рис. 1) был получен как разность функций  $\theta(E)$  для YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,07</sub> и YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,93</sub>; отнормированных на вес образцов и на поток падающих нейтронов. Для сравнения на этом же рисунке представлен спектр колебаний атомов Cu в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,93</sub> из<sup>6</sup>. Видно, что наибольшая плотность колебательных состояний меди приходится на энергетический диапазон 10–30 мэВ, в котором наблюдаются отчетливые пики. Границная энергия спектра  $E_{\text{гр}} \sim 40$  мэВ. Уменьшение концентрации кислорода приводит к смягчению спектра колебаний атомов Cu, а при  $E = 15$  мэВ возникает дополнительная полоса, которой не было в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6,93</sub>. Положение границной энергии спектра практически не изменяется. Можно предположить, что смягчение спектра связано с ослаблением силового взаимодействия вследствие изменения окружения атомов меди, а полоса при  $E = 15$  мэВ отвечает колебаниям Cu1, расположенным в плоскости, лишенной кислорода.

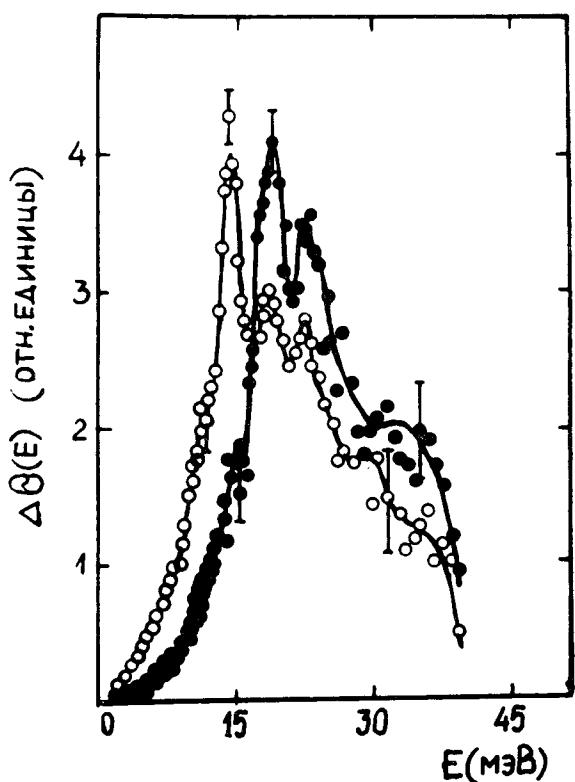


Рис. 1. Парциальная плотность колебаний атомов Cu; ○ –  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,07}$ , ● –  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,93}$ .

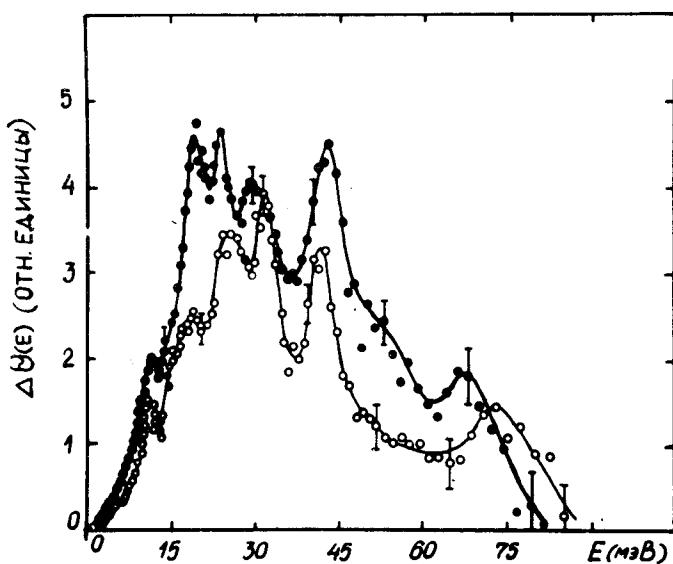


Рис. 2. Парциальная плотность колебаний атомов O: ○ –  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,07}$ , ● –  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,93}$

Из-за относительно большой массы атомов Y и Ba и малой величины фактора  $\sigma/M$  для этих элементов по сравнению с кислородом, можно пренебречь вкладом колебаний Y и Ba в полученное спектральное распределение при  $E > 20$  мэВ<sup>4, 5</sup>. Следовательно, разность между полным спектром колебаний  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$  и парциальным спектром колебаний атомов Cu представляет собою парциальный спектр колебаний атомов O в диапазоне  $E > 20$  мэВ (рис. 2). Наиболее существенные изменения в спектре колебаний атомов O, возни-

кающие при удалении кислорода из позиций O<sub>4</sub>, наблюдаются вблизи энергий 25,45 и 80 мэВ и проявляются, в частности, в ужесточении границы спектрального распределения колебаний. Как показано в <sup>9</sup>, концентрационная зависимость граничной энергии спектра колебаний наблюдается только в соединениях с орторомбической решеткой, обладающих металлической проводимостью. В связи с этим, по аналогии с металлами и сплавами естественно предположить, что ужесточение спектра колебаний атомов O связано с ослаблением экранирования межионного взаимодействия свободными носителями, в частности, как следует из <sup>10</sup>, за счет понижения плотности электронных состояний на уровне Ферми при уменьшении концентрации кислорода. Различное влияние кислорода O<sub>4</sub> на граничную энергию колебательного спектра атомов Cu и O коррелирует с выводом <sup>10</sup> о наличии двух электронных подсистем, связанных с атомами Cu и O. Предположения о существовании двух электронных подсистем высказывались также в работах <sup>11, 12</sup>, посвященных исследованию различных физических свойств YBCO.

Авторы выражают благодарность В.А.Соменкову и К.А.Кикоину за обсуждение полученных результатов, А.Р.Каулю и Н.А.Бабушкиной за приготовление образца с изотопом Cu<sup>65</sup>.

Работа поддерживается Научным советом по проблеме ВТСП и выполняется в рамках проектов №№ 166, 169 и 172 Государственной программы "Высокотемпературная сверхпроводимость".

#### Литература

1. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. Часть 3, М.: Наука, 1965, с. 352.
2. Паршин П.П. и др. В сб.: Сверхпроводимость, М.: ИАЭ, 1988, 2, 30.
3. Натканец И. и др. Письма в ЖЭТФ, 1988, **48**, 166.
4. Renker R. et al. Z. Phys. B, 1988, **71**, 437.
5. Bruesch W., Bunker W. Z. Phys. B, 1988, **70**, 1.
6. Паршин П.П. и др. СФХТ, 1989, **2**, 29.
7. Землянов М.Г. и др. ПТЭ, 1973, **5**, 34.
8. Парфенов О.Е., Чернышев А.А. СФХТ, 1989, **2**, 5.
9. Zemlyanov M.G. et al. In: Progress in High Temperature Superconductivity. Singapore: WSPC, 1990, **21**, 151.
10. Huai-Yu Wang. J. Phys. Condens. Matt., 1989, **1**, 1983.
11. Michio Enjiwara, Kazuhiko Yamaya. Bulletin of the Faculty of Engineering, Hokkaido University, 1989, №147.
12. Иоон Э. и др. Письма в ЖЭТФ, 1989, **50**, 296.

Институт атомной энергии  
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию  
2 марта 1990 г.