

01;02;05;11

©1995 г.

## АНИЗОТРОПИЯ ПОРОГОВЫХ ЭНЕРГИЙ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ КИСЛОРОДА В ПЕРОВСКИТНОЙ СТРУКТУРЕ

*Н.Н.Дегтяренко, В.Ф.Елесин, В.Л.Мельников*

Московский инженерно-физический институт,  
115409, Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 24 декабря 1994 г.)

В окончательной редакции 9 ноября 1994 г.)

Методом молекулярной динамики (МД) детально рассчитаны значения пороговой энергии смещения  $E_d$  в зависимости от угла вылета атомов кислорода. Определены значения пороговой энергии смещения  $E_d$  для атомов кислорода в разных позициях для большинства предлагавшихся в литературе видов парных потенциалов и проведено их сравнение. Обнаружено, что минимальное значение энергии  $E_d \approx 5$  эВ соответствует направлению от позиции 01 на структурную вакансию 05. Максимальное значение энергии  $E_d \approx 20$  эВ и более соответствует направлениям преимущественно вдоль оси  $c$ . Показано, что энергия  $E_d$  — сильно анизотропная величина для всех кислородных позиций в структуре  $YBa_2Cu_3O_7$ . Установлено, что в присутствии дефекта  $E_d$  атомов кислорода уменьшаются в сравнении с бездефектной структурой в несколько раз. Рассчитаны траектории выбитых атомов кислорода и найдены типы дефектов после релаксации и вероятные перемещения атомов кислорода при радиационном воздействии на структуру  $YBa_2Cu_3O_7$ . Основным типом дефектов ортофазы  $YBa_2Cu_3O_7$  оказываются атом кислорода, перемещенный из позиций 01, 04, 02 в структурную вакансию 0.5, и образование вакантных мест в исходных положениях.

### Введение

Одним из фундаментальных параметров вещества, определяющих его реакцию на радиационное воздействие, является энергия смещений атомов. Она хорошо изучена теоретически и экспериментально для моновеществ (элементов). Гораздо меньше работ имеется даже для простых соединений. Однако представляет значительный интерес величина  $E_d$  для сложных соединений. Во-первых, потому что они могут представлять научный и практический интерес, во-вторых, для получения информации о природе атомных связей. Например, разрушение сложных веществ обычно идет по слабым связям, поэтому наибольшее внимание должно уделяться определению наименьших значений  $E_d$ . Таковым объектом представляются соединения с перовскитной и перовскитоподобной структурой, например  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ .

Теоретически вычисления  $E_d$  могут быть сделаны только методом молекулярной динамики (МД). Единственными известными нам работами по определению  $E_d$  в  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  являются работы В.В.Кирсанова с сотрудниками [1] (см. также работы [2,3]). Авторы [1-3] использовали потенциалы парного взаимодействия из [4]. Видимо, из-за сравнительно небольшого объема моделируемого кристаллита рассматривался ограниченный набор углов вылета первично выбитого атома в плоскостях (100) и (010) под небольшим углом к оси структуры  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Обнаружено, что в исследованных направлениях существует минимум  $E_d \sim 8$  эВ. Метод стабилизации решетки в расчетном кристаллите, влияние граничных условий и дальнедействующей кулоновской части взаимодействия в работе [1-3] не обсуждались.

В данной работе методом молекулярной динамики (МД) с использованием в основном потенциалов из работ [5-7] детально рассчитаны значения пороговой энергии смещения  $E_d$  в зависимости от угла вылета атомов кислорода. Обнаружено, что минимальное значение энергии  $E_d \approx 5$  эВ соответствует направлению от позиции 01 на структурную вакансию 05 (т.е. соответствует направлению, не рассматривавшемуся в [1]). Максимальное значение энергии  $E_d \approx 20$  эВ и более соответствует направлениям преимущественно вдоль оси  $c$ . Показано, что энергия  $E_d$  — сильно анизотропная величина для всех кислородных позиций в структуре  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Определены значения пороговой энергии смещения  $E_d$  для атомов кислорода в разных позициях для большинства предлагавшихся в литературе видов парных потенциалов и проведено их сравнение. Установлено также, что в присутствии дефекта  $E_d$  атомов кислорода уменьшаются в сравнении с бездефектной структурой в несколько раз.

Из полученных минимальных значений  $E_d$  дана оценка расчетной радиационной стойкости  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  в сравнении с интерметаллидами со структурой A15. Их соотношение соответствует отношению пороговых энергий смещения 1/6. Кроме того, рассчитаны траектории выбитых атомов кислорода, найдены типы дефектов после релаксации и вероятные перемещения атомов кислорода при радиационном воздействии на структуру  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Основным типом дефекта ортофазы  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  оказываются атом кислорода, перемещенный из позиций 01, 04, 02 в структурную вакансию 05, и образование вакантных мест в исходных положениях.

## Межатомный потенциал и методика расчетов.

### Обсуждение возможности расчета дефектной структуры

1. ВТСП представляют собой ионный кристалл, поэтому большое значение при расчете его энергетических характеристик имеет учет кулоновского взаимодействия. Зарядовое состояние ионов в ВТСП является предметом обсуждения во многих работах, например [8-12], в которых рассчитывается энергия Маделунга на узлах  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Вклад ионного взаимодействия в энергию всего кристалла составляет 80-90% [8]. Как показано в [13,14], кулоновское взаимодействие создает потенциальный рельеф с большими градиентами электрического поля.

Короткодействующая часть потенциала обычно записывается в стандартной форме Борна-Майера

$$\varphi(r) = A_R \exp(-b_R r), \quad (1)$$

а для взаимодействия кислород-кислород добавляются слагаемые вида  $1/r^6$ , которые учитывают эффект поляризации ионов [5-7, 15-17]. Для улучшения стабильности решетки в ряде работ вводится также дополнительное трехчастичное взаимодействие — в системе Ва-О-Ва [7], или в плоскостях  $\text{CuO}_2$  [5, 16]. Параметры потенциалов подбираются исходя из упругих свойств и подобия фононных спектров.

Полная внутренняя энергия  $E$  в ВТСП равна сумме межатомных потенциалов парного взаимодействия  $\varphi$

$$E = 1/2 \sum_i \sum_j \varphi(r_{ij}). \quad (2)$$

Вкладом в энергию, зависящим от объема кристаллита, обычно пренебрегают, имея в виду небольшую в сравнении с металлами концентрацию свободных носителей.

2. Кулоновский тип взаимодействия атомов в рассматриваемых соединениях приводит к невозможности ограничиваться при моделировании малыми объемами с небольшим количеством атомов. Возникает необходимость учитывать кулоновское взаимодействие с большим количеством атомов, окружающих расчетный кристаллит. Как показывают наши численные эксперименты, для корректного определения потенциальной энергии атомов необходимо учитывать кулоновское воздействие от атомов на расстояниях до нескольких десятков постоянных решетки. Рассмотрение движения всех этих атомов делает прямую задачу динамического моделирования невыполнимой из-за ограниченности ресурса ЭВМ.

Возможно применение к кристаллу разумных размеров (например,  $6 \times 6 \times 4$  при числе атомов в элементарной ячейке, равном 13) метода молекулярной динамики при условии аппроксимации кулоновского взаимодействия с атомами, находящимися за пределами этого объема, рассчитанным заранее потенциальным рельефом. Эта часть потенциала для кристалла  $6 \times 6 \times 4$  имеет вид потенциальной ямы с квазипериодическим рельефом масштаба  $\sim 2$  В в середине и периодом порядка постоянных решетки. В процессе расчетов этот вклад от далеких атомов учитывался с помощью пространственной сетки, по узлам которой проводилась интерполяция.

Таким образом, потенциальная энергия кристалла состоит из трех слагаемых: а) короткодействующего потенциала Борна-Майера и Ван-дер-Ваальса, б) кулоновского взаимодействия рассматриваемых атомов, в) энергии рассматриваемых атомов в потенциале удаленных неподвижных атомов.

Большинство результатов данной работы получены при использовании потенциала парного взаимодействия Баэтзолда [5-7].

Часто используемая модель периодических граничных условий в данном случае неприменима из-за введения сетки от внешних атомов. Приходится либо задавать жесткие границы, т.е. фиксировать пограничные атомы, либо вводить квазиупругую стабилизацию для пограничных атомов относительно их местоположения в идеальной решетке.

В последнем случае возможно также введение квазивязкой диссипации энергии в пограничном слое.

3. Традиционно при моделировании дефектов в новых структурах первым ставится вопрос о вычислении энергий в конфигурации точечных дефектов: вакансий, междоузельных атомов, затем пар Френкеля и т.д. Важнейшим вопросом адекватности результатов моделирования является вопрос о неизменности зарядового состояния атомов. Для рассмотрения дефектов различного типа (замещений, вакансий на кислородной подсистеме) приходится делать априорные предположения о перераспределении зарядов между ионами.

В ионных кристаллах введение междоузельного атома приводит к изменению зарядового состояния всего кристаллита либо ионов в ближайшем окружении, поскольку ионы кислорода, а в некоторых моделях и ионы меди находятся в разных зарядовых состояниях в различных узлах решетки. Было бы трудно ожидать сохранения этих состояний при их переходе в междоузельное положение. Моделировать такой процесс перезарядки в рамках МД метода не представляется возможным. То же самое относится и к вакансиям. Расчет конфигурации коррелированных пар Френкеля, видимо, лишен этого препятствия (по крайней мере для пар малого размера, располагающихся в одной элементарной ячейке). Таким образом, представляется возможным, если не учитывать изменения зарядового состояния, моделировать методом МД только конфигурации, слабо отличающиеся от недеформированного кристалла.

В качестве задачи, связанной с дефектностью и наиболее удовлетворяющей этому ограничению, представляется корректным расчет энергии смещения атома  $E_d$ , так как образование устойчивой пары Френкеля минимальных размеров является здесь минимально возможным искажением зарядового локального состояния кристалла.

4. Для решения этой задачи для всех атомов применялась стандартная последовательность действий. Сначала рассчитывался потенциальный рельеф для атома, смещаемого из своего равновесного положения в недеформируемой решетке. Потенциальный рельеф позволял определить возможные междоузельные положения смещаемого атома и оценить направление и порядок величины  $E_d$ . Затем для различных направлений первоначальной скорости выбиваемого атома рассчитывалось движение атомов кристаллита при сообщении данному атому энергии  $E$ . Значение  $E$  увеличивалось в каждом последующем расчете, пока в результате не образовалась устойчивая пара Френкеля (как правило, одна). В большинстве расчетов энергия увеличивалась с шагом  $0.5 \text{ эВ}$ , в области минимальных  $E_d$  шаг был на порядок меньше. В результате был получен набор пространственных диаграмм зависимости пороговой энергии смещения данного атома от направления первоначального смещения.

### Результаты расчетов анизотропии пороговых энергий смещения атомов кислорода

В большинстве работ предполагается, что основным результатом радиационного повреждения иттриевой керамики считается разупорядочение  $\text{Cu-O}$  цепочек в плоскости  $\text{Cu-O}$ , т.е. переходы кислородных атомов из узлов 04 в структурные вакансии 05.

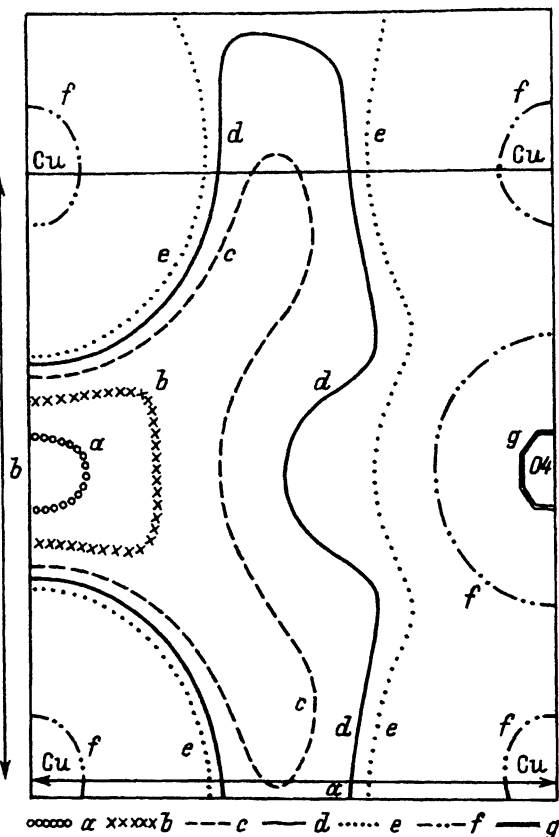


Рис. 1. Потенциальный рельеф для смещаемого в плоскости (010) атома кислорода, первоначально находившегося в позиции 04.

$a = -33$ ,  $b = -30$ ,  $c = -25$ ,  
 $d = -20$ ,  $e = -15$ ,  $f = 1000$ ,  
 $g = 1.e10$ .

Как показывают наши расчеты, общая картина сложнее. На рис. 1 представлен потенциальный рельеф для смещения атома 04 из его положения равновесия в плоскости Cu-O. Энергия его в ближайшем положении 05 увеличивается на 13 эВ, но это положение в идеальной нерелаксированной решетке оказывается неустойчивым (на рис. 1 отсутствует минимум потенциальной энергии перемещенного атома в положении 05). Переход же его в другую ячейку требует дополнительной энергии несколько эВ, кроме того, траектория его движения оказывается криволинейной.

Несколько меньше энергия смещения мостикового кислорода 01. На рис. 2 представлен потенциальный рельеф для смещения атома 01 в плоскости (010). Как следует из наших расчетов, энергия его перехода в структурную вакансию 05 порядка 5 эВ и это его положение является устойчивым, хотя и имеет небольшую ( $\sim 2$  эВ) энергию активации обратного перехода. Переход же его в удаленную структурную вакансию 05 требует энергии 18 эВ.

Из аналогичных расчетов для атома кислорода в положении 02 следует, что энергия, требуемая для смещения атома из положения 02 в структурную вакансию 05, оказывается достаточно велика — 22 эВ. Для этого атома оказывается энергетически более выгоден переход в соседнюю ячейку по пути между плоскостями  $\text{CuO}_2$  с энергией 20 эВ. Анализ результатов расчетов показывает, что другие устойчивые по-

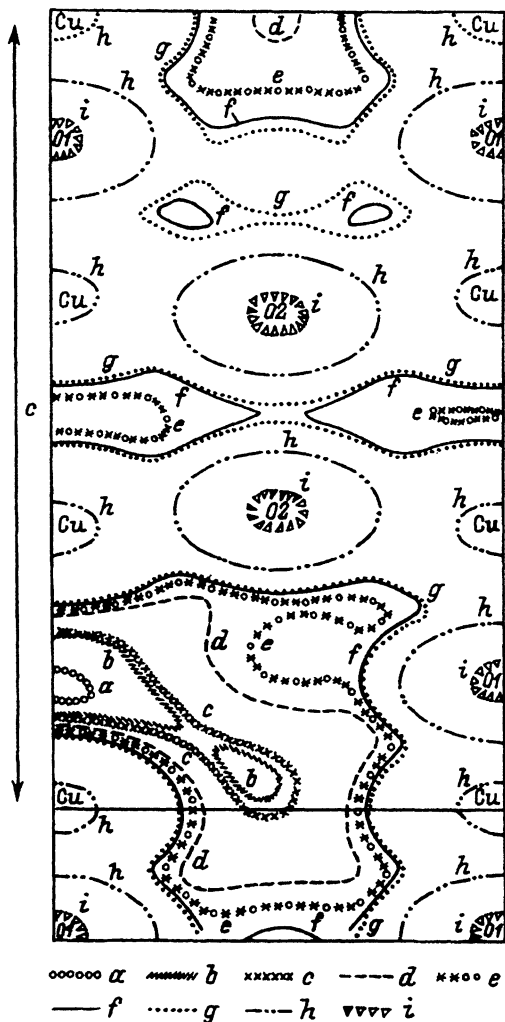


Рис. 2. Потенциальный рельеф для смещаемого в плоскости (010) атома кислорода, первоначально находившегося в позиции 01.  
 $a = -30$ ,  $b = -26$ ,  $c = -25$ ,  $d = -14$ ,  
 $e = -7$ ,  $f = 1$ ,  $g = 4$ ,  $h = 1000$ ,  $i = 1.e10$ .

ложения междоузельного атома кислорода оказываются отделенными высокими энергетическими барьерами плоскостей  $\text{CuO}_2$  (41 эВ для 04 и 02 и 38 эВ для 01). Его перемещение и расположение в окрестности мостикового кислорода обычно приводят к перестройке образующейся дефектной структуры за счет низкоэнергетического перехода мостикового кислорода в вакансию 05.

На рис. 3, а-г-5 приведены итоговые результаты расчетов угловых зависимостей пороговой энергии  $E_d$  образования дефектов при смещении атомов кислорода из позиций 01, 04 и 02 в полностью упорядоченной структуре  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Эти результаты представлены в виде диаграмм для некоторых наиболее интересных плоскостей элементарной ячейки. Угловые зависимости имеют ряд особенностей. Качественно их вид подтверждает ряд результатов приведенных ниже, которые мы наблюдали при визуализации процессов выбивания атомов кислорода из соответствующего узла решетки.

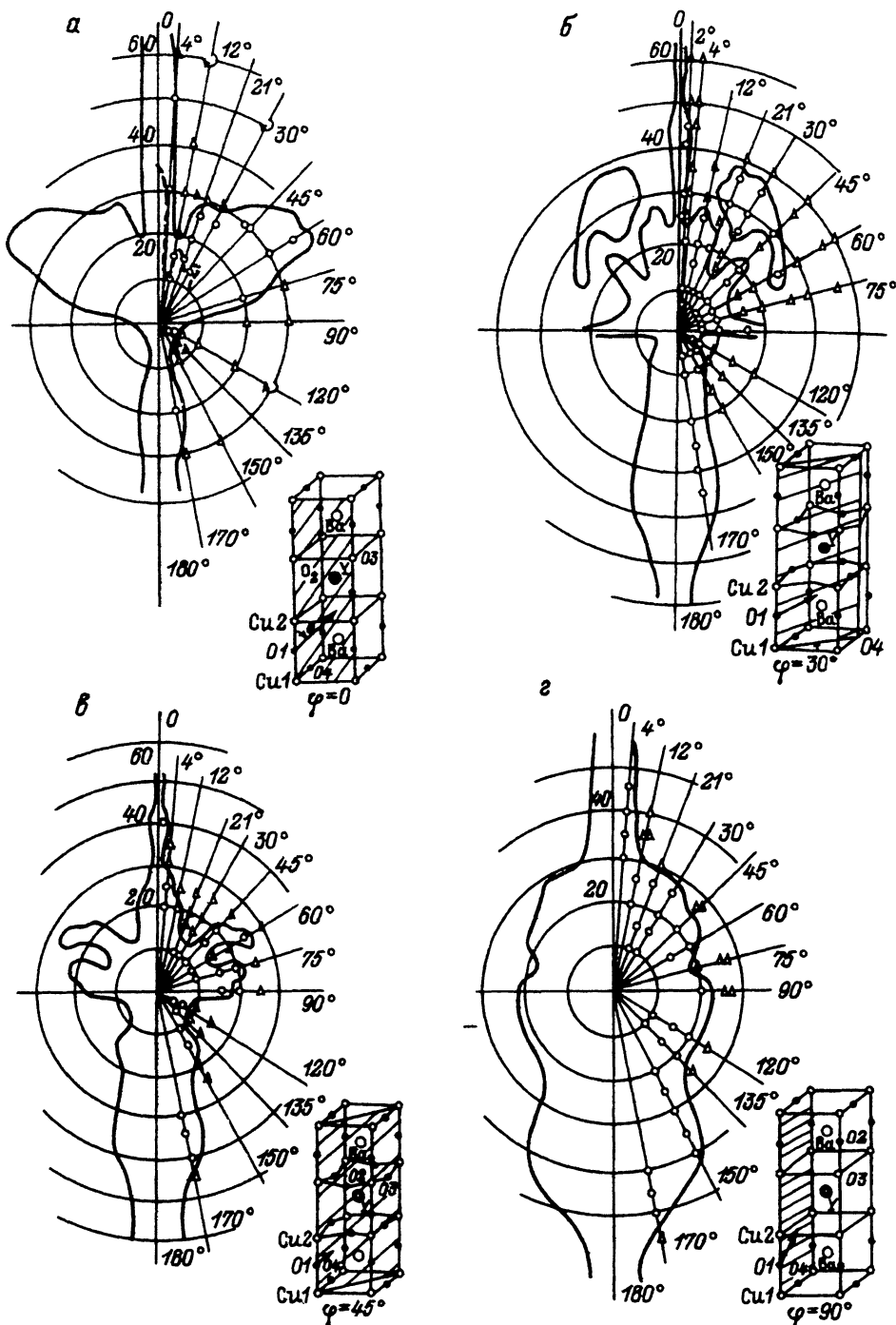


Рис. 3. Угловая зависимость энергии смещения  $E_d$  атома кислорода из позиции 01 от аксиального угла  $\theta$  для разных значений полярного угла.

$\varphi$ : а — 0, б — 30, г — 45, д — 90°; о — выбивание атома из узла решетки,  $\Delta$  — возврат атома в узел решетки. Штриховая линия на рис. 3, а ( $\varphi=0$ ) — результаты для  $E_d$ , полученные в [3], для сравнения.

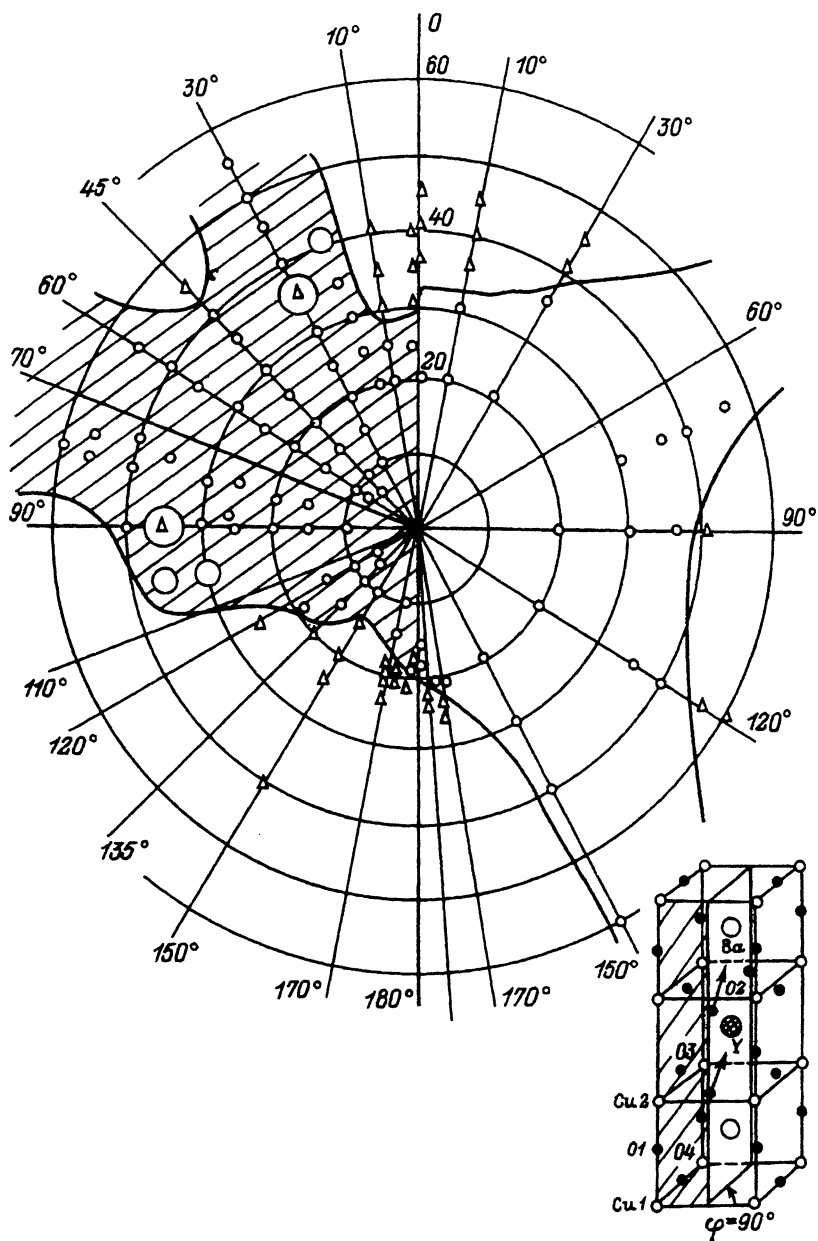


Рис. 4. Угловая зависимость энергии смещения  $E_d$  атома кислорода из позиции O2 от аксиального угла для разных значений полярного угла:  $\varphi = 90^\circ$  (справа),  $0$  (слева).

Наиболее вероятный тип дефектов — образование вакансии в кислородной подсистеме (обычно на месте ПВА) и перемещение ПВА в базовую плоскость Cu—O на место вакансии O5. В ряде случаев образуются криволинейные цепочки замещения по кислородной подсистеме.

Пороговая энергия  $E_d$  анизотропна. Для ПВА O1 (мостиковый кислород)  $E_d$  максимальна для направлений вдоль оси  $c$  и минимальна



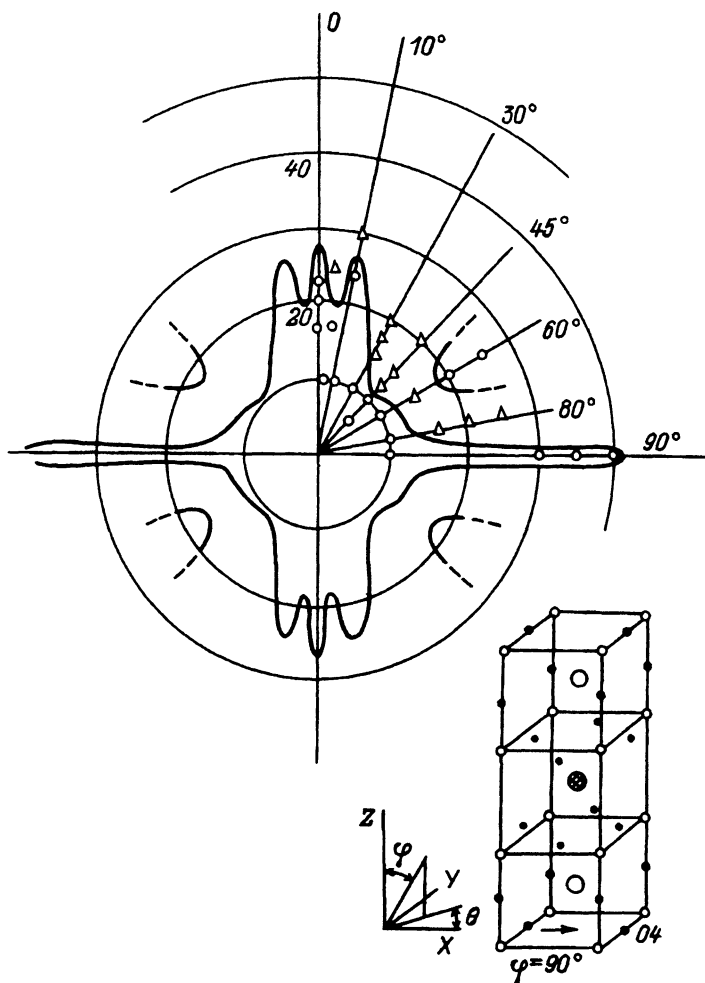


Рис. 5. Угловая зависимость энергии смещения  $E_d$  атома кислорода из позиции 04 от полярного угла  $\varphi$  в плоскости  $\text{CuO}$  ( $\theta = 90^\circ$ ).

Штриховая линия — результаты для  $E_d$ , полученные в [3].

для вылета в направлении структурной вакансии 05 ( $\vartheta = 135^\circ$ ,  $\varphi = 0$ ). Минимумы на угловой зависимости  $E_d$  обусловлены отражением ПВА от впереди стоящих атомов и уходом его в структурную вакансию 05 по потенциальному коридору.

Для ряда направлений (рис. 3, 6,  $\vartheta \sim 20-60^\circ$  и  $\varphi \sim 30^\circ$ ) возникает неоднозначность поверхности пороговой энергии, что обусловлено возвратом ПВА на свое место после двойного отражения, т.е. потенциальный коридор проходит ПВА дважды (туда и обратно).

Определяющим для образования дефекта в модели являются наличие облегченного перехода в базовую плоскость и существование структурных вакансий 05. Минимальные энергии для образования дефектов для атома кислорода в позиции 01 равны  $5 \pm 0.5$  эВ, для атома кислорода в позиции 02 —  $20 \pm 1$  эВ, для атома кислорода в позиции 04 —  $12 \pm 1$  эВ.

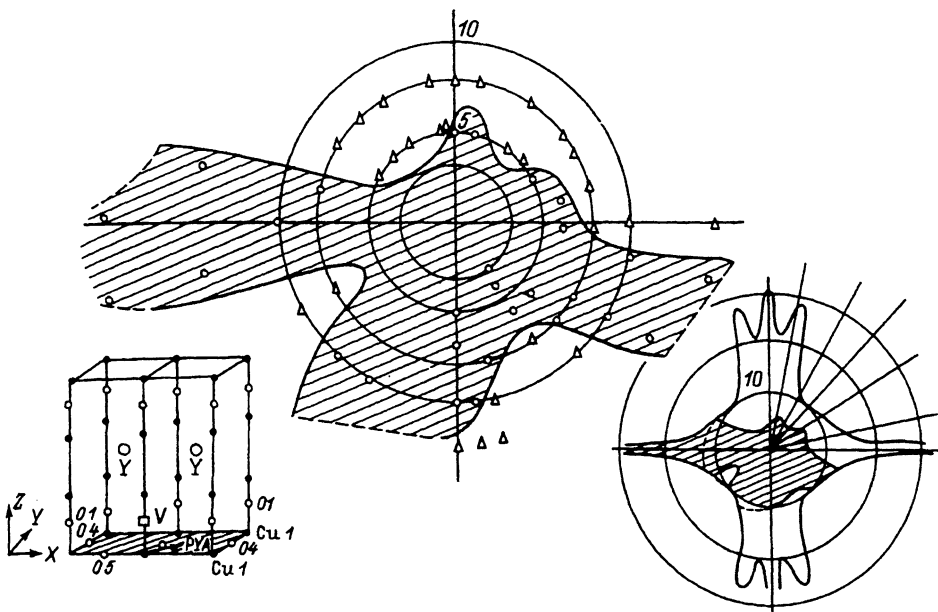


Рис. 6. Угловая зависимость энергии смещения  $E_d$  атома кислорода из позиции 04 от полярного угла  $\varphi$  в плоскости  $\text{CuO}$  ( $\theta = 90^\circ$ ) в присутствии дефекта Шоттки в соседней элементарной ячейке. Правая диаграмма — сравнение с  $E_d$  для идеального кристалла.

Из сравнения результатов расчетов следует, что влияние других дефектов на пороговую энергию смещения атомов из узла значительно. На рис. 6 показана угловая зависимость пороговой энергии смещения атома кислорода из позиции 04 в 05 (разупорядочение цепочек базовой плоскости) в присутствии в соседней ячейке дефекта Шоттки (атом кислорода перемещен из позиции 01 в позицию 05).  $E_{d \min}$  в этом случае уменьшилась с 12 эВ для идеальной структуры до 3 эВ. Относительное уменьшение  $E_d$  по другим направлениям еще больше, но направление, соответствующее минимальному  $E_d$ , сохраняется.

Менее вероятным типом дефектов является перемещение атома кислорода из позиции 02 (плоскость  $\text{CuO}_2$ ) в вакантные места, окружающие атомы Y. Такой тип дефектов образовывался только для атомов ПВА 02 и только для определенных углов и энергий. При этом одновременно на симметричное вакантное место, напротив атома Y, перемещается второй атом 02 из верхней плоскости  $\text{CuO}_2$ . В результате образуются две вакансии в плоскости  $\text{CuO}_2$  и два атома кислорода, окружающие Y.

### Расчеты по другим потенциалам и обсуждение

В рамках расчета по единому комплексу программ показано, что для всех центрально симметричных потенциалов, предложенных разными авторами для структуры  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{1-x}$ , качественные результаты, представленные выше, являются общими. Другие параметры потенциалов парного взаимодействия были предложены также Уэлчем [18] и Чаплотом [4]. Рассчитанные потенциальные рельефы для этих

потенциалов подобны приводимому для потенциала Баэтзолда, за исключением наличия потенциальной ямы для атома мостикового кислорода в положении 05: потенциальной ямы для этих потенциалов в недеформированной решетке нет. Для проверки возможности образования дефектов с минимальной энергией рассчитано поведение кристалла при смещении атомов 01 в направлении структурной вакансии 05 и атомов 04 в направлении той же вакансии. Результаты расчетов показывают, что деформация решетки в окрестности междоузельного атома кислорода в позиции 05 приводит к его стабилизации в этом положении. Пороговые энергии смещения в направлениях к позиции 05 представлены в таблице.

Атом	Потенциалы		
	уэлч [18]	чаплот [4]	баэтзолд [5-7]
0.4	20-25 эВ	3-5 эВ	12 эВ
0.1	3-5 эВ	1-2 эВ	5 эВ

Следует отметить, что при использовании параметров потенциалов [4,18] жесткость решетки оказывается примерно втрое меньше, чем для потенциала Баэтзолда, что в меньшей степени соответствует жесткости реальных кристаллов.

Как отмечалось во Введении, в [1-3] использовался потенциал парного взаимодействия из [4] для решения, в частности, задач по нахождению  $E_d$  у различных атомов, однако рассматривался ограниченный интервал углов вылета ПВА из-за сравнительно небольшого размера кристаллита. Из рис. 3, а и 5, где приведены также данные из [3], видно их качественное совпадение в общем интервале углов, но абсолютные величины  $E_d$  отличаются примерно в два-три раза, как и в таблице. Этот результат подтверждает предположение, что в рамках использованных потенциалов качественный характер угловой зависимости сохраняется.

Следовательно, при малых характерных энергиях ПВА, когда определяющим для образования дефектов является энергия смещения  $E_d$ , общая картина радиационного повреждения  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  выглядит следующим образом: наиболее вероятный процесс — разрушение структуры базовой плоскости  $CuO$  за счет перемещения в нее атомов мостикового кислорода и ее разупорядочения; менее вероятный процесс ( $E_d$  больше) — разрушение плоскости  $CuO_2$  вакансиями, статическими искажениями и парными смещениями.

Такой характер повреждений будет, в частности, при электронном облучении с энергией электронов, образующих ПВА небольших энергий, порядка  $E_d$ . Данный результат внешне противоречит результатам работы [19], в которой с использованием несколько модифицированного в сравнении с [4] потенциала рассмотрено развитие каскада столкновений в ортофазе структуры  $YBa_2Cu_3O_7$ . Каскад инициировался ПВА  $Cu(2)$  с энергией 100-300 эВ в направлении, составлявшем угол  $20^\circ$  с осью  $c$ . Основной вывод авторов — каскад расщепляется на субкаскады, разделенные слоями атомов  $Y$ . Смещения в основном сосредоточены в плоскости  $Cu(1)-O(4)$  и приводят к более равномерному распределению атомов кислорода по позициям  $O(4)$  и  $O(5)$ . В

работе не упоминается о переходах атомов кислорода из позиций  $O(1)$  в плоскость  $CuO$ .

На наш взгляд, этот интересный результат является следствием ряда причин. Во-первых, направление развития каскада выбрано таким, что в него мог попасть только один атом  $O(1)$ . Из рисунков работы трудно установить, имело ли место такое перемещение. Во-вторых, форма образовавшегося каскада, его резкое уширение при входе в плоскость  $CuO$ , такова, что он захватывает значительное число атомов кислорода в позиции  $O(4)$ , т.е. в данном случае именно форма каскада наряду с  $E_d$  определяет конечное число дефектов.

Мы предполагаем, что наблюдавшаяся в работе [19] форма каскада является следствием соотношения размеров каскада и размером неоднородности слоевой структуры  $YBa_2Cu_3O_7$  по массовой плотности. Действительно, вблизи атомов  $Y$  сосредоточены слои атомов тяжелых металлов. Базовая плоскость  $CuO$ , наоборот, содержит даже структурные вакансии. Аналогия наблюдавшейся формы каскада качественно соответствует, например, уширению светового пучка при входе в оптически менее плотную среду.

Представляется интересным развитие каскада не только в направлении, близком к оси  $c$ , но и в других, поскольку минимуму энергии  $E_d$  у  $O1$  соответствует его смещение в направлении на структурную вакансию. Таких данных у нас в настоящее время нет. Таким образом, предварительно можно утверждать, что полученные угловые зависимости  $E_d$  являются достаточно надежными. На их основе можно определять количество смещенных атомов.

Существует интервал энергий ПВА ( $E \sim 300$  эВ [19]), где важную роль с точки зрения типа образующихся дефектов может играть слоевая структура  $YBa_2Cu_3O_7$ , т.е. форма каскада, если его размеры порядка оси  $c$  элементарной ячейки.

## Выводы

1. В работе в рамках центрально-симметричного потенциала взаимодействия атомов найден один из фундаментальных параметров вещества, определяющих его реакцию на радиационное воздействие, — энергия смещений атомов. Энергия  $E_d$  — сильно анизотропная величина, поэтому радиационная стойкость монокристалла должна быть значительно выше при облучении тонких монокристаллов вдоль оси  $c$ .

2. Малая пороговая энергия смещения атомов кислородной подсистемы является причиной более низкой радиационной стойкости  $YBa_2Cu_3O_7$  в сравнении с интерметаллидами со структурой  $A15$  примерно в отношении пороговых энергий смещения (1/6). Основной причиной деградации сверхпроводящих свойств ВТСП, по-видимому, является хаотизация потенциала в области плоскостей  $CuO_2$ , ответственных за спариванием носителей за счет дефектов типа вакансий и перемещения атомов кислорода в плоскости  $CuO$ .

3. При малых характерных энергиях ПВА, когда определяющим для образования дефектов является энергия смещения  $E_d$ , основным типом дефектов при смещении атома кислорода в ортофазе  $YBa_2Cu_3O_7$  является заполнение структурных вакансий  $O5$  и образование вакантных мест в положениях  $O1$  и  $O2$ , а также разупорядочение в базисной

плоскости — перемещение кислорода между позициями 04–05, т.е. подтверждается статистическая модель разупорядочения структуры данных соединений, рассмотренная в [20].

4. Исходно дефектные структуры и, по-видимому, структуры  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  с  $x \neq 0$  должны обладать меньшими значениями пороговой энергии смещения (в сравнении с ортофазой  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}$ ) и, следовательно, менее радиационно стойки.

Работа проведена при финансовой поддержке гранта М51000 Международного Научного Фонда и проекта 93-02-14220 Российского фонда фундаментальных исследований РАН.

### Список литературы

- [1] *Kirsanov B.B., Musin H.H.* // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. Вып. 23. С. 71–74.
- [2] *Kirsanov V.V., Musin N.N.* // Phys. Lett. A. 1990. Vol. 143. N 8. P. 420–424.
- [3] *Kirsanov V.V., Musin N.N.* // Phys. Lett. A. 1991. Vol. 153. N 8/9. P. 423–428.
- [4] *Chaplot S.I.* // Phys. Rev. 1990. Vol. B47. N 4. P. 2149–2154.
- [5] *Baetzold R.C.* // Phys. Rev. 1988. Vol. B38. N 16. P. 11304–11309.
- [6] *Baetzold R.C.* // Physica C. 1991. Vol. 181. P. 252–260.
- [7] *Baetzold R.C.* // Phys. Rev. 1990. Vol. B42. N 1. P. 56–66.
- [8] *Iguchi E., Yonezawa Y.* // Jap. J. Appl. Phys. 1987. Vol. 26. N 9. P. L1492–L1494.
- [9] *Kondo J., Asai Y., Nagai S.* // J. Phys. Soc. Jap. 1988. Vol. 57. N 12. P. 4334–4342.
- [10] *Kondo J., Asai Y., Nagai S.* // Bull. Electrotechn. Lab. 1989. Vol. 53. N 2. P. 3–16.
- [11] *Feiner L.F., de Lecuw D.M.* // Sol. St. Commun. 1989. Vol. 30. N 12. P. 1165–1169.
- [12] *Tan N.X., Bourdillon A.J.* // Inter. J. Modern Phys. B. 1990. Vol. 4. N 3. P. 517–524.
- [13] *Lyubutin I.S., Terziev V.G., Dmitrieva T.V., Gor'kov V.P.* // Phys. Lett. A. 1989. Vol. 137. N 3. P. 144–148.
- [14] *Любутин И.С., Терзиев В.Г., Горьков В.П.* // ЖЭТФ. Т. 95. Вып. 5. С. 1908–1912.
- [15] *Lewis G.V., Catlow C.R.A.* // J. Phys. C. 1985. Vol. 18. N 6. P. 1149–1161.
- [16] *Wright N.F., Butler W.H.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. N 7. P. 4219–4227.
- [17] *Безумов Т.Б., Желудков С.В., Жетбаев А.К.* // СФХТ. 1991. Т. 4. № 6. С. 1084–1087.
- [18] *Valkealahti S., Welch O.* // Phys. C. 1989. Vol. 162–164. P. 540–541.
- [19] *Kirsanov V.V., Musin N.N., Roskin D.G., Shamarina E.I.* // Phys. Lett. A. 1992. Vol. 163. № 1–2. P. 112–116.
- [20] *Дегтяренко Н.Н., Елесин В.Ф., Мельников В.Л., Штырев Д.А.* // СФХТ. 1989. Т. 2. № 11. С. 95–105.