

## ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$

А. В. Баженов, В. Б. Тимофеев

Важным этапом на пути к пониманию механизма высокотемпературной сверхпроводимости является выяснение электронной структуры как сверхпроводящей фазы, так и соответствующих ей металлического и диэлектрического состояний. В предлагаемой работе изучаются низкоэнергетичные электронные переходы в первую очередь в области 0.5 эВ, которые могут служить медиаторами спаривания свободных носителей в сверхпроводнике. Наличие перехода 0.5 эВ в  $\text{La}(\text{Sr})\text{CuO}$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (123) не вызывает сомнений, однако имеющаяся информация о его свойствах противоречива, что объясняется сложным строением исследованных объектов: керамик, порошков, эпитаксиальных пленок [1], ориентированных керамик [2]. Недавно в спектрах отражения света монокристаллами  $\text{La}_2\text{NiO}_4$ ,  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [3, 4],  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [5] обнаружено, что переход 0.5 эВ анизотропен, активен в поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$  ( $\mathbf{C}$  — нормаль к купратной плоскости). В ряде работ утверждается, что сила осциллятора этого перехода уменьшается с увеличением концентрации свободных носителей в соединениях 123 [1],  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [5]; в других работах переход наблюдается и в высокопроводящих эпитаксиальных пленках  $\text{LaSrCuO}$  [6], в соединениях 123 в виде монокристаллов [7], ориентированных пленок [8], порошков [9], причем в 123 симметрия перехода неизвестна.

Исследовались монокристаллы 123 размером  $2 \times 3 \times 0.5$  мм, полученные раствор-расплавным методом с использованием алуновдого тигля. Исходные кристаллы переходили в сверхпроводящее состояние при  $T_c = 60$  К. Для выяснения влияния содержания кислорода на свойства перехода 0.5 эВ проводились последовательные изохронные отжижки образцов в вакууме  $10^{-5}$  бар в течение 17 ч при 100, 200 и 300 °С. Спектры отражения света измерялись на Фурье-спектрометре при 300 К в спектральном диапазоне от 50 до  $6000 \text{ см}^{-1}$  в геометрии, близкой к нормальному падению линейно-поляризованного света с волновым вектором  $\mathbf{q} \perp \mathbf{C}$ . С помощью поляризационного оптического микроскопа было установлено, что исходные кристаллы неоднородны. Методом ИК микроскопии и комбинационного рассеяния света были измерены локальные спектры отражения и спектральные положения линии полносимметричного валентного колебания мостикового кислорода в различных областях образца. Оказалось, что монокристалл, среднее содержание кислорода в котором  $x=0.4$ , является системой, макроскопически расслоенной на области с  $x=0.6$  и  $0.25$  с высокой и низкой высокочастотной проводимостью соответственно.

В спектре отражения исходного монокристалла (рис. 1) наблюдается широкая линия с максимумом около  $3500 \text{ см}^{-1}$ . В спектре поглощения, полученном преобразованием спектра отражения с помощью соотношений Крамерса—Кронига, этой линии соответствует особенность 0.6 эВ. Существенным результатом является то, что, во-первых, данный переход наблюдается только в поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$ , во-вторых, с уменьшением содержания кислорода наряду с уменьшением отражения, обусловленного свободными носителями, исчезает и линия  $3500 \text{ см}^{-1}$ .

Ярко выраженная анизотропия перехода 0.6 эВ свидетельствует о том, что он происходит в высокосимметричной точке зоны Бриллюэна (рис. 2). В соответствии с теоретическими расчетами [10, 11] такой переход по аналогии с внутрицентровым  $d-d$  переходом в  $\text{Cu}^{2+}$  [8] можно объяснить возбуждением электрона из ветви, расположенной ниже уровня Ферми, в пу-

сты состояния, описываемые гибридованными волновыми функциями  $\text{Cu}3d_{x^2-y^2} + 0.2p_{x,y}$  купратных плоскостей (зоны  $A_1$  и  $A_2$ ), либо связать его с ветвью  $C$ , определяемой цепочками  $\text{CuO}$ . Однако, учитывая, что аналогичный переход наблюдается и в соединениях на основе  $\text{La}$ , где цепочки от-

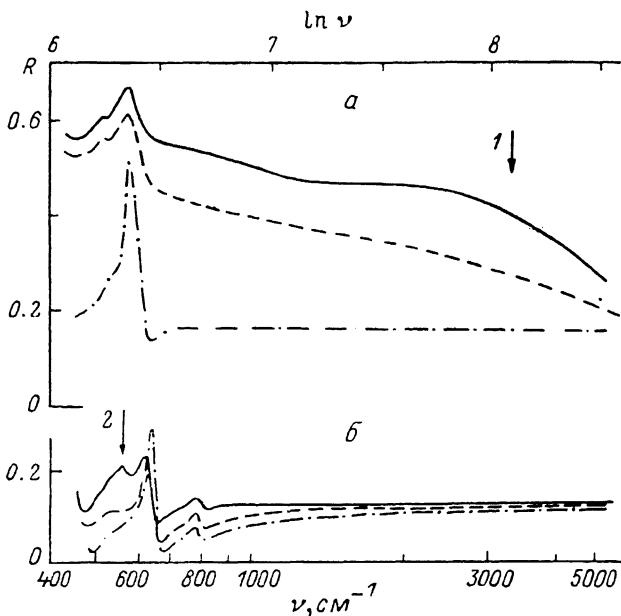


Рис. 1. Влияние изохронного отжига в вакууме на спектры отражения монокристалла  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  в поляризациях  $E \perp C$  (а) и  $E \parallel C$  (б).

Волновой вектор света  $q \perp C$ . Сплошные кривые — спектры исходного образца, пунктир и штрих-пунктир — спектры после отжига при 200 и 300 °С соответственно. Стрелками отмечены электронный переход 1 в районе  $3500 \text{ см}^{-1}$  (0.45 эВ), проявляющийся в поглощении около 0.6 эВ, и переход 2 —  $565 \text{ см}^{-1}$  (0.07 эВ).

сутствуют, следует остановиться на первом варианте. Таким образом, переход происходит в точке  $S$  зоны Бриллюэна, причем в качестве начального состояния выступает, по-видимому, ветвь, определяемая гибридованными волновыми функциями кислорода и  $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$ .

В спектральном диапазоне, где локализованы линии оптических фононов, наблюдались сравнительно слабые «лишние» линии  $530 \text{ см}^{-1}$  ( $E \perp C$ ) и  $565$ ,

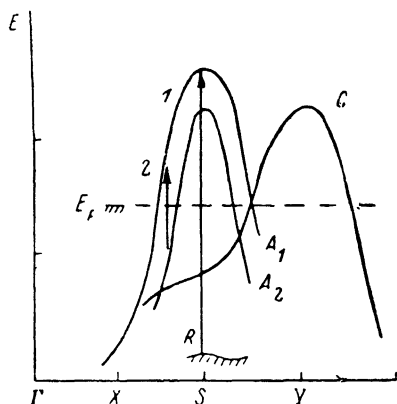


Рис. 2. Схема электронных переходов 1 (0.6 эВ) и 2 (0.07 эВ) рис. 1.

Двухмерные зоны  $A_1$  и  $A_2$  определяются комбинацией  $\text{Cu}3d_{x^2-y^2} + 0.2p_{x,y}$  орбиталей купратных плоскостей, одномерная  $C$ -зона — цепочками  $\text{CuO}$ ,  $R$ -зона — гибридом волновых функций  $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$  и кислорода.

$787 \text{ см}^{-1}$  ( $E \parallel C$ ). Линия  $565 \text{ см}^{-1}$  отличается тем, что ее интенсивность уменьшается аналогично переходу 0.6 эВ при снижении содержания кислорода в результате отжига в вакууме (рис. 1). Такая «лишняя» линия ( $570 \text{ см}^{-1}$ ) наблюдалась и в спектрах комбинационного рассеяния (КР) и объяснялась проявлением ИК-активной моды в поле дефектов кристалла [12]. В то же время при исследовании спектров пропускания порошков аналогичное поведение линии  $575 \text{ см}^{-1}$  связывалось с проявлением КР-активной моды в ИК спектре вследствие ее взаимодействия с нижележащим электронным переходом [9] либо с  $\text{Cu}1\text{—}04$  антисиммет-

ричным колебанием, взаимодействующим с электронным переходом с переносом заряда [13]. Не отрицая моделей [9, 12, 13], заметим, что не исключена возможность объяснения природы линии  $565 \text{ см}^{-1}$  ( $0.07 \text{ эВ}$ ), активной в поляризации  $E \parallel C$ , как электронного перехода из заполненных состояний зоны  $A_2$  (рис. 2) в пустые состояния  $A_1$  в области уровня Ферми  $E_F$ . В таком случае падение интенсивностей линий  $0.07$  и  $0.6 \text{ эВ}$  с уменьшением содержания кислорода (и соответственно концентрации свободных носителей) можно объяснить либо подъемом  $E_F$  выше зоны  $A_1$ , либо радикальной перестройкой зонной схемы (рис. 2), рассчитанной для металлического состояния, при переходе к диэлектрической фазе.

Авторы выражают благодарность Е. Г. Максимова за полезные обсуждения данной работы.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Bozovic I., Kirillov D., Kapitulnik A. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 19. P. 2219—2221.
- [2] Lu F., Perry C. H., Chen K. e. a. // J. Opt. Soc. Am. B. 1989. V. 6. N 3. P. 396—402.
- [3] Eklund P. C., Rao A. M., Lehman G. W. e. a. // J. Opt. Soc. Am. B. 1989. V. 6. N 3. P. 389—395.
- [4] Gervais F., Echegut P., Bassat J. M. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 16. P. 9364—9372.
- [5] Nichol A. C., Pratt F. L., Hayes W. e. a. // J. Opt. Soc. Am. B. 1989. V. 6. N 3. P. 403—408.
- [6] Tanaka J., Shimada M., Mizutani U. e. a. // Phys. C. 1988. V. 153—155. P. 1752—1755.
- [7] Schlesinger Z., Collins R. T., Kaiser D. L. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 17. P. 1958—1961.
- [8] Geserich H. P., Koch B., Scheiber G. e. a. // Europhys. Lett. 1988. V. 6. N 3. P. 277—282.
- [9] Ruani G., Tallani C., Zamboni R. e. a. // Phys. C. 1988. V. 153—155. P. 645—646.
- [10] Krakauer H., Pickett W. E., Cohen E. // J. Supercond. 1988. V. 1. N 1. P. 111—141.
- [11] Mattheiss L. F., Hamann D. R. // Sol. St. Comm. 1987. V. 63. N 5. P. 395—399.
- [12] McCarty K. F., Hamilton J. C., Shelton R. N. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 4. P. 2914—2917.
- [13] Sood A. K., Sankaran K., Hariharan Y. e. a. // J. Phys. 1988. V. 31. N 5. P. 389—397.

Институт физики твердого  
тела АН СССР  
Черноголовка  
Московская область

Поступило в Редакцию  
19 октября 1989 г.

УДК 669.71 : 539.382. : 537.39

© Физика твердого тела, том 32, № 4, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 4, 1990

## К ВОПРОСУ ОБ ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОМ ЭФФЕКТЕ

*О. А. Троцкий, Ю. В. Никитенко*

Электронно-пластический эффект (ЭПЭ) представляет собой пластификацию деформируемого металла под влиянием электрического тока, сопровождаемую теми или иными тепловыделениями. Для реализации ЭПЭ требуется одновременное действие тока высокой плотности и механических напряжений выше предела текучести. На диаграммах растяжения или сжатия фиксируются сбросы механической нагрузки или скачки деформирующего усилия [1, 2]. Они являются результатом удлинений (или укорочений в случае сжатия) образцов под действием импульсов тока, которые, вообще говоря, могут включать в себя, помимо ЭПЭ, и тепловую дилатацию (удлинение), а также псевдотермическую часть действия тока.