

## ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЕ ПОЛЯРНЫЕ ЦЕНТРЫ И АНОМАЛЬНЫЙ ИЗОТОПИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МЕДЬ-КИСЛОРОДНЫХ ВТСП

А. С. Москвитин, Ю. Д. Панов

Уральский государственный университет им. А. М. Горького  
620083, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 5 мая 1996 г.

Изотопический эффект в медь-кислородных ВТСП рассмотрен в рамках модели полярных ян-теллеровских центров — одном из вариантов модели локальных бозонов. Показатели изотоп-эффекта по кислороду и меди зависят от структуры ян-теллеровских центров и ее изменения при движении бозона. На примере ряда составов на основе  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  показана возможность количественного объяснения экспериментально наблюдаемых величин  $\alpha_{\text{Cu}}$  и  $\alpha_{\text{O}}$  и их связи с  $T_c$ .

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В работах [1, 2] предложена модель полярных ян-теллеровских центров, которая естественным образом объединяет различные модельные подходы, основанные на идее локального спаривания и предельно сильного электронно-колебательного взаимодействия, а также частично примиряет сторонников «зарядового», «структурного» и «спинового» сценариев ВТСП. Медные оксиды в этой модели рассматриваются как системы, неустойчивые относительно реакции диспропорционирования с образованием системы дырочных ( $\text{CuO}_4^{5-}$ ) и электронных ( $\text{CuO}_4^{7-}$ ) полярных ян-теллеровских центров ( $h$ - и  $e$ -центры), отличающихся  $S$ -бозоном — двумя электронами, спаренными в полностью заполненной молекулярной оболочке. Фактически фаза полярных центров представляет систему локальных  $S$ -бозонов, движущихся в решетке дырочных ян-теллеровских центров, обеспечивающих как локальное спаривание, так и эффективную экранировку бозон-бозонного отталкивания.

Необыкновенные свойства полярных ян-теллеровских центров являются следствием квазивырождения в основном состоянии — близости энергии сильнокоррелированных термов  ${}^1A_{1g}$  (синглет Занга-Райса) конфигурации типа  $b_{1g}^2$  и  ${}^{1,3}E_u$  конфигурации  $b_{1g}e_u$  [2, 3], что и приводит к многомодовому псевдоэффекту Яна-Теллера с активными модами смещений ядер  $\text{CuO}_4$ -кластеров типа  $Q_{b_{1g}}$ ,  $Q_{b_{2g}}$  и  $Q_{e_u}$ .

Таким образом, структура основного и нижних возбужденных состояний ян-теллеровской решетки будет формироваться с участием синглетных и триплетных спиновых, четных невырожденных и нечетных вырожденных орбитальных состояний отдельных центров, а также ряда активных квадрупольных ( $Q_{b_{1g}}$ ,  $Q_{b_{2g}}$ ) и дипольных ( $Q_{e_u}$ ) мод локальных смещений ядер  $\text{CuO}_4$ -кластеров. Схематически структура нижних энергетических уровней полярного ян-теллеровского центра типа  $\text{CuO}_4^{5-}$  или  $\text{CuO}_4^{7-}$  представлена на рис. 1. Обратим внимание на величину  $\Delta_{AE}$  — основной параметр псевдоэффекта Яна-Теллера. Она определяет степень  ${}^1A_{1g}$ - ${}^1E_u$ -гибридизации, характеристики адиабатического потенциала ян-теллеровского центра, а также параметр синг-

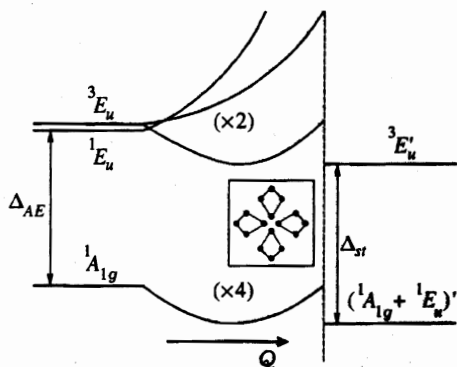


Рис. 1. Структура нижних энергетических уровней полярного ян-теллеровского центра. На вставке схематически показаны четыре типа искажений квадратного кластера  $\text{CuO}_4$ , соответствующие четырем минимумам адиабатического потенциала

лет-триплетного расщепления  $\Delta_{st}$ , играющий важную роль во взаимодействии зарядовой и спиновой подсистем [2].

Модель полярных ян-теллеровских центров позволяет естественным образом объяснить весь широкий спектр необычных физических свойств медных оксидов. При этом, несмотря на сложную структуру ян-теллеровских центров, в большинстве случаев удастся построить достаточно простую и наглядную физическую картину того или иного явления.

В данной работе мы хотели бы проиллюстрировать это на примере изотопического эффекта, являющегося исторически одной из главных «улик» в пользу электронно-колебательного механизма сверхпроводимости.

Не останавливаясь на анализе всей драматической истории обнаружения и исследования изотоп-эффекта в медь-кислородных ВТСП, отметим всего лишь ряд принципиальных моментов:

1. Проблема получения достоверных значений  $\alpha$  — показателя изотоп-эффекта ( $T_c \sim M^{-\alpha}$ ) в медных оксидах, связанная с невозпроизводимостью результатов, наличием различных неэквивалентных позиций атомов кислорода и меди, неточным определением  $T_c$  и многими другими факторами. В качестве наиболее яркой иллюстрации здесь можно привести работы по селективному изотоп-эффекту [4, 5], в которых авторы получили различный по знаку изотопический сдвиг  $T_c$ .

2. Совершенно необычный характер изотоп-эффекта в медных оксидах, начиная с весьма широкого интервала наблюдаемых значений  $\alpha$  (от больших положительных  $\alpha \sim 1.5$  (!) по кислороду до заметных отрицательных по меди).

3. Обнаружение ряда закономерностей и эмпирических правил [6] типа:

а) высокие  $T_c$  — низкие  $\alpha$  — малые ширины сверхпроводящего перехода — малые барьерные коэффициенты  $\partial T_c / \partial p$ ;

б) низкие  $T_c$  — высокие  $\alpha$  — большие ширины сверхпроводящего перехода — высокие барьерные коэффициенты  $\partial T_c / \partial p$ .

4. Отсутствие теоретической модели, способной объяснить основные особенности изотоп-эффекта, несмотря на существование довольно большого числа работ с объяснением отдельных экспериментальных фактов (см., например, [7]).

В связи с попытками теоретического объяснения особенностей изотоп-эффекта в медь-кислородных ВТСП отметим модельные подходы работ [8, 9], отдельные элементы которых близки по духу нашей концепции ян-теллеровских центров.

В целом на сегодня получен достаточно большой объем достоверных экспериментальных результатов исследования различных особенностей изотоп-эффекта, прежде всего, в системах  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с различными замещениями (Pr, Pr:Ca, Zn, La, ...) [6, 11, 14], что требует построения адекватной теоретической модели, которая, в свою очередь, должна быть составной частью единого сценария ВТСП.

Сложность такой задачи связана, в частности, с возможностью проявления в медных оксидах необычных механизмов изотоп-эффекта, отсутствующих в стандартных БКШ-сценариях и БКШ-системах. В связи с этим отметим перколяционный механизм образования трехмерного сверхпроводящего состояния, который может «работать» на больших участках фазовой диаграммы медных оксидов [2]. Переход металл-диэлектрик в этих системах реализуется путем образования фазово-неоднородного состояния (разделение фаз), принципиальную роль в котором играют области зарядовой неоднородности (СІ-центры) с центрами типа ионов  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ce}^{4+}$ , кислородных вакансий, «лишних» ионов кислорода в оксидах  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , ... [2].

Именно СІ-центры являются центрами образования зародышей фазы полярных центров. Рост  $x$  — концентрации СІ-центров сопровождается увеличением объема новой фазы, что при определенных условиях ( $x = x_{cr}$ ) приводит к перколяции и появлению  $T_c$ , возрастающей с ростом  $x$ . При достижении определенной концентрации  $x'_{cr}$  новая фаза охватывает весь объем образца. Ясно, что на перколяционном участке зависимости  $T_c(x)$  ( $x_{cr} < x < x'_{cr}$ ) изотоп-эффект может быть связан с изотопическим изменением объема новой фазы.

Отметим, что СІ-центры формируют узкую квазипримесную зону и определяют положение энергии Ферми. С узкой зоной могут быть связаны низкочастотные зарядовые возбуждения типа акустических плазмонов [7], обеспечивающих эффективную экранировку электростатического отталкивания бозонов, а также ряд «маргинальных» свойств медных оксидов [7].

Именно с характером пространственного распределения параметра порядка в СІ-центрах может быть связан  $s$ - и (или)  $d$ -сценарий сверхпроводимости. Низкочастотные зарядовые и фазовые возбуждения в СІ-центрах проявляются в спектрах неупругого рассеяния нейтронов и спектрах фотоэмиссии углового разрешения.

Принципиально «оксидной» особенностью изотоп-эффекта в медь-кислородных ВТСП является потенциально сильное влияние замещения  $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$  ( $\Delta M/M = 12.5\%$ ) на изменение параметров решетки, потенциалов Маделунга, кристаллических полей и других важных физико-химических характеристик, определяющих величину  $T_c$ .

## 2. ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЙ МЕХАНИЗМ ИЗОТОП-ЭФФЕКТА

Основной механизм изотоп-эффекта в однородной фазе полярных центров связан с зависимостью интеграла переноса  $S$ -бозона от параметров адиабатического потенциала ян-теллеровского центра и массы колебательных мод:

$$T_c \sim t = K_{eh} t^{(0)}, \quad (1)$$

где  $t^{(0)}$  — чисто электронная часть интеграла переноса,

$$K_{eh} = \langle \chi_e | \chi_h \rangle^2 \quad (2)$$

— фактор вибронной редукции,  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$  — интеграл перекрыwania колебательных состояний, соответствующих определенной яме адиабатического потенциала для электронного и дырочного полярных центров.

Важнейшим следствием соотношений (1), (2) является вывод о принципиальной возможности существования «оптимизированных» систем, для которых адиабатические потенциалы дырочного и электронного ян-теллеровских центров совпадают.

В таких системах  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle \equiv 1$  и движение  $S$ -бозонов не сопровождается изменением адиабатического потенциала ян-теллеровских центров. Более того, для оптимизированного состава условие  $K_{eh} = 1$  соответствует максимуму функции  $K_{eh} = K_{eh}(\Delta_e, \Delta_h, k_e, k_h, V_e, V_h, \dots)$  в пространстве различных параметров ян-теллеровских центров ( $k$  — упругие константы,  $V$  — вибронные константы):

$$\frac{\partial K_{eh}}{\partial \Delta_e} = \frac{\partial K_{eh}}{\partial \Delta_h} = \frac{\partial K_{eh}}{\partial k_e} = \dots = 0, \quad (3)$$

что приводит к подавлению флуктуаций фактора вибронной редукции, а значит флуктуаций интеграла переноса и критической температуры  $T_c$  в реальных системах.

В оптимизированных системах возможно разделение зарядовой, структурной и спиновой подсистем, а влияние ян-теллеровской решетки может быть сведено к экранировке бозон-бозонного отталкивания.

Для оптимизированных систем следует ожидать:

- а) максимальных  $T_c$ ;
- б) минимальной ширины сверхпроводящего перехода;
- в) полного отсутствия изотоп-эффекта;
- г) минимальных значений барического коэффициента  $\partial T_c / \partial p$  и аналогичных «восприимчивостей».

Подчеркнем, что отсутствие изотоп-эффекта в оптимизированных составах является особенностью не слабого, а наоборот — аномально сильного электронно-колебательного взаимодействия, характерного для эффекта Яна-Теллера.

Для оптимизированной системы параметры  $\Delta_{AE}$  «затравочного»  ${}^1E_u - {}^1A_{1g}$ -орбитального расщепления, а вместе с ним и параметры  $\Delta_{st}$  синглет-триплетного расщепления (см. рис. 1) в дырочном и электронном центрах совпадают. Следовательно, спиновая подсистема перестает реагировать на перестройку зарядовых корреляций вблизи  $T_c$ , что должно сказываться на характере магнитного неупругого рассеяния нейтронов [10].

Конечно, оптимизированная система — скорее исключение, чем правило. Среди известных медь-кислородных ВТСП на эту роль может претендовать оптимально допированный состав  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  при  $0 \leq \delta \leq 0.1$  [11]<sup>1)</sup>.

В более реальной ситуации движение локального бозона будет сопровождаться изменением адиабатического потенциала ян-теллеровского центра, прежде всего вследствие различия затравочных параметров  $\Delta_{AE}$  для дырочных и электронных ян-теллеровских центров. Этот факт автоматически приводит к сильной связи зарядовых, структурных и спиновых флуктуаций<sup>2)</sup> и радикальным образом сказывается на всех физических свойствах медных оксидов.

<sup>1)</sup> Обратим внимание на убывание интенсивности магнитного неупругого рассеяния нейтронов в этой системе [10].

<sup>2)</sup> Речь идет о синглет-триплетном смешивании и о флуктуациях спиновой мультиплетности.

Анализ фактора вибронной редукции в общем случае даже с учетом хорошо известных в теории эффекта Яна–Теллера методов [12] представляет очень сложную задачу.

Действительно, в интересующей нас ситуации псевдоэффекта Яна–Теллера адиабатический потенциал имеет четыре минимума. Нормальные моды колебаний в минимумах имеют гибридный  $(b_{1g} - e_u x)$ - и  $(b_{2g} - e_u y)$ -характер. Другими словами, сечение адиабатического потенциала вблизи минимума представляет собой прямую сумму двух эллипсов (эллипсов поляризации), ориентация и длина полуосей которых сложным образом зависят от параметра  $\Delta_{AE}$ , вибронных констант, масс атомов кислорода и меди.

Волновая функция основного колебательного состояния является скалярном ( $s$ -функция) и имеет обычный вид:

$$\chi(Q) = \pi^{-1/4} l^{-1/2} e^{-Q^2/2l^2}, \tag{4}$$

где  $l$  — характерная длина осциллятора, сложным образом зависящая от параметров эллипса поляризации. Расчет интеграла перекрытия функций  $\chi(Q)$  для электронного и дырочного ян-теллеровских центров  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$  в общем случае усложняется из-за невозможности разделения переменных, соответствующих гибридизующимся модам  $Q_{b_{1g}}$  и  $Q_{e_u x}$ ,  $Q_{b_{2g}}$  и  $Q_{e_u y}$ .

Функциональная зависимость фактора вибронной редукции имеет вид

$$K_{ch} = N e^{-\gamma} \tag{5}$$

со сложной структурой предэкспоненциального фактора  $N$  и показателя степени  $\gamma$ , который зависит от массы осцилляторов и расстояния между соответствующими минимумами адиабатического потенциала в  $e$ - и  $h$ -центрах примерно как и в одномодовом случае:

$$\gamma \sim \sqrt{m} (\Delta Q). \tag{6}$$

На рис. 2а приведены решения уравнения  $K_{eh}(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$ , которые можно рассматривать фактически как «изотермы», т. е. решение уравнения

$$K_{eh} = \frac{T_c(\Delta_e, \Delta_h)}{T_c(\Delta_e = \Delta_h)} = \frac{T_c}{T_c^{\text{max}}} = \text{const}.$$

Карта «изотерм» наглядно показывает неоднозначность  $T_c$  как функции электронных параметров  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$ .

На рис. 2б приведена зависимость фактора вибронной редукции от безразмерного параметра

$$\kappa = \frac{\Delta_e - \Delta_h}{\bar{\Delta}} \tag{7}$$

при различных значениях параметра  $\bar{\Delta} = \Delta_e + \Delta_h$ , где  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$  отсчитывались от минимального значения, при котором адиабатический потенциал имеет четыре минимума. При этом все остальные параметры ян-теллеровской задачи для  $e$ - и  $h$ -центров считались одинаковыми и выбирались так, чтобы обеспечить разумные значения энергий осцилляторов ( $\hbar\omega_0 \sim 100 \text{ см}^{-1}$ ), энергий ян-теллеровской стабилизации ( $E_{JT} \sim 1000 \text{ см}^{-1}$ ), характерных длин осцилляторов ( $l_0 \sim 0.1 \text{ \AA}$ ).

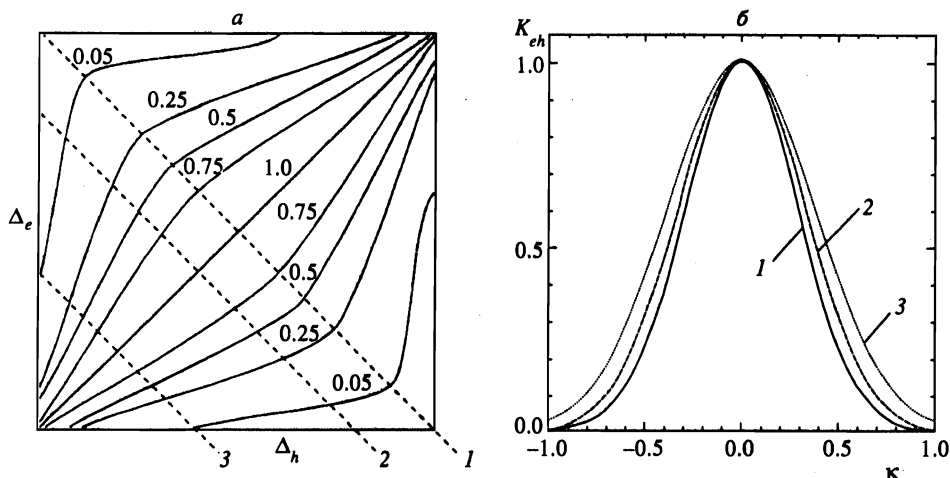


Рис. 2. а) Решения уравнения  $K_{eh}(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$  для различных значений  $\kappa$ . б) Зависимости фактора вибронной редукции  $K_{eh}$  от безразмерного параметра  $\kappa$  (см. текст) на сечениях 1, 2, 3 плоскости  $(\Delta_e, \Delta_h)$

Как уже отмечалось выше, фактор  $K_{eh}$  максимален ( $\equiv 1$ ) при  $\kappa = 0$  и убывает с ростом  $\kappa$ : плавно при малых  $\kappa$  ( $\partial K_{eh}/\partial \kappa \rightarrow 0$  при  $\kappa \rightarrow 0$ ) и резко при  $|\kappa| \rightarrow 1$ . Для составов, близких к оптимизированным ( $\kappa = 0$ ), фактор  $K_{eh}$  слабо зависит от  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$ , поскольку для них  $\partial K_{eh}/\partial \Delta_e = \partial K_{eh}/\partial \Delta_h = 0$ .

Зависимость фактора вибронной редукции от массы атомов кислорода и меди вносит определяющий вклад в изотопический эффект для медь-кислородных ВТСП.

Полагая в рамках теории решеточного бозе-газа [13]  $T_c \sim t$ , получим

$$\alpha = -m \frac{\partial \ln T_c}{\partial m} = -m \frac{\partial \ln K_{eh}}{\partial m} = -m \frac{\partial \ln N}{\partial m} - m \frac{\partial \gamma}{\partial m}. \quad (8)$$

В простейшем одномодовом случае предэкспоненциальный фактор  $N$  не зависит от массы моды  $m$ , а  $\gamma \sim \sqrt{m}(\Delta Q)^2$ , так что  $\alpha \geq 0$  и его величина определяется в основном расстоянием  $\Delta Q$  между минимумами адиабатического потенциала для  $e$ - и  $h$ -центров.

В многомодовом случае ситуация значительно усложняется и изотоп-эффект будет определяться не только величиной  $\Delta Q$ , но и зависимостью от массы атомов ориентации и отношения длин полуосей эллипсов поляризации. Изменение массы атомов кислорода (или меди) приводит к деформации и повороту эллипсов поляризации колебательных мод в  $e$ - и  $h$ -центрах, что будет приводить к изменению (увеличению или уменьшению) интеграла перекрытия  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$  (см. рис. 3). В результате появляется отличный от нуля вклад в  $\alpha$  предэкспоненциального фактора  $N$ , причем его знак может быть как положительным, так и отрицательным (!).

Отрицательный изотоп-эффект в нашей модели может наблюдаться практически только для меди. Для этого прежде всего нужно обеспечить подавление положительного  $\gamma$ -вклада в  $\alpha_{Cu}$ , т.е. условие  $\partial \gamma / \partial m_{Cu} \ll 1$ . Именно такая ситуация реализуется в рассмотренной выше  $(\Delta_e, \Delta_h)$ -модели, предполагающей различие  $e$ - и  $h$ -центров только в параметрах  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$ .

На рис. 4 представлен ряд зависимостей  $\alpha_O(\kappa)$ ,  $\alpha_{Cu}(\kappa)$  при различных  $\bar{\Delta}$ , а также

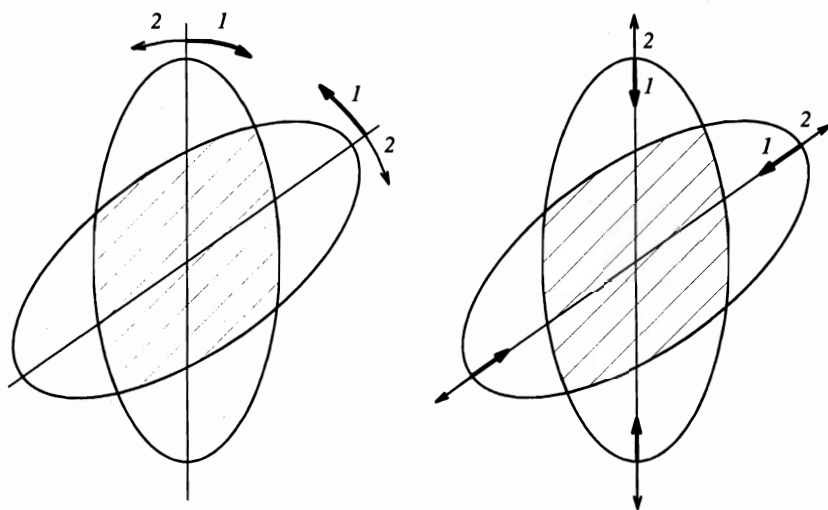


Рис. 3. К иллюстрации зависимости интеграла перекрытия колебательных функций электронного и дырочного центров  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$  от деформации и поворота эллипсов поляризации при изотоп-замещении. Процессы типа 1 (указаны жирной стрелкой) приводят к увеличению  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$ ; типа 2 (тонкая стрелка) — к уменьшению  $\langle \chi_e | \chi_h \rangle$

«изотопы» — решения уравнений  $\alpha_0(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$  или  $\alpha_{Cu}(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$ . Обратим внимание на интервалы возможного изменения  $\alpha_{Cu}$  и  $\alpha_0$ , а также на несовпадение «изотоп» и «изотерм» (см. рис. 2а), что указывает, в частности, на отсутствие однозначных зависимостей  $\alpha(T_c)$ .

На рис. 5 представлен ряд зависимостей типа  $\alpha(K_{eh}) = \alpha(T_c/T_c^{max})$  для  $\alpha_0$  и  $\alpha_{Cu}$ , соответствующих определенным траекториям на плоскости  $(\Delta_e, \Delta_h)$ , обеспечивающим, в частности, как отрицательные (кривая 1 для  $\alpha_{Cu}$ ), так и положительные (кривые 2, 3 для  $\alpha_{Cu}$ ) значения изотопического эффекта по меди. Для составов с  $\alpha_{Cu} < 0$  характерны относительно большие положительные значения  $\alpha_0$ , получаемые как результат сложения сравнительно малого отрицательного вклада в  $\alpha_0$  гибридной моды преимущественно медного  $e_u$ -типа и относительно большого положительного вклада в  $\alpha_0$  колебательной моды, имеющей преимущественно чисто кислородный  $b_{1g}$ -характер. При этом  $\alpha_0$  может достигать величин, заметно превышающих  $\alpha_{BCS} = 0.5$ .

В то же время для составов с  $\alpha_{Cu} > 0$  оба вклада в  $\alpha_0$  компенсируют друг друга, что дает относительно небольшие величины  $\alpha_0$ .

На рис. 5 приведен также ряд экспериментальных значений  $\alpha_0$  и  $\alpha_{Cu}$  в зависимости от  $T_c/T_c^{max}$  для ряда составов  $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [6],  $Y_{0.8-y}Pr_{0.2}Ca_yBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [6],  $YBa_{2-x}La_xCu_3O_{7-\delta}$  [14],  $YBa_2Cu_{3-x}Zn_xO_{7-\delta}$  [6],  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [11], генетически связанных с модельным оптимизированным составом  $YBa_2Cu_3O_{6.93}$  с  $T_c^{max} \approx 93$  К. Естественно, что в общем случае для этих систем зависимость  $T_c(x)$  будет соответствовать различным «траекториям» на плоскости  $(\Delta_e, \Delta_h)$  с различным поведением  $\alpha(x)$ .

Обратим внимание на подобие зависимостей  $\alpha_0(T_c)$  в системе 1–2–3 с фиксированным  $\delta$  и замещением в Y- или Ba-подрешетке, т. е. вне активных  $CuO_2$ -плоскостей. Это свидетельствует о примерно одинаковом характере изменения параметров  $\Delta_e$  и  $\Delta_h$  (с сохранением  $\bar{\Delta}$ ) при таком замещении (близкие  $(\Delta_e, \Delta_h)$ -траектории).

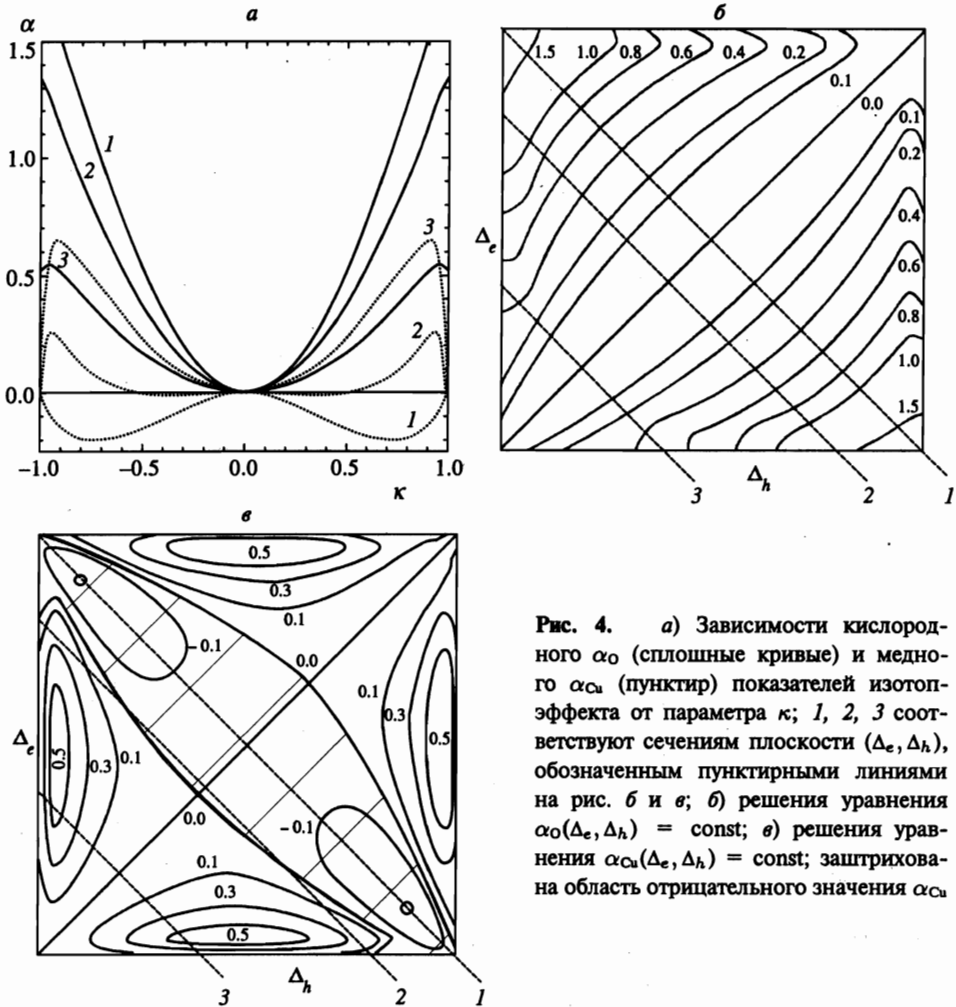
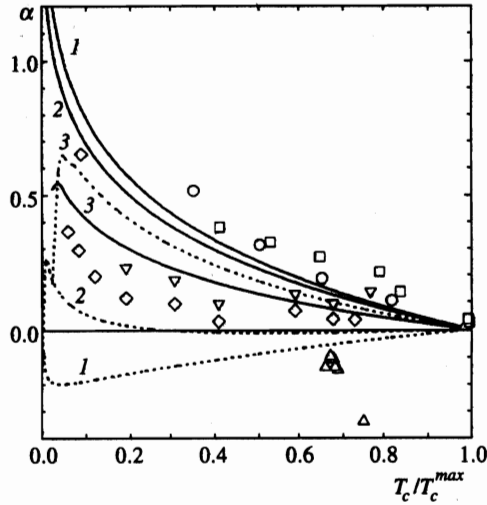


Рис. 4. а) Зависимости кислородного  $\alpha_O$  (сплошные кривые) и медного  $\alpha_{Cu}$  (пунктир) показателей изотоп-эффекта от параметра  $\kappa$ ; 1, 2, 3 соответствуют сечениям плоскости  $(\Delta_e, \Delta_h)$ , обозначенным пунктирными линиями на рис. б и в; б) решения уравнения  $\alpha_O(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$ ; в) решения уравнения  $\alpha_{Cu}(\Delta_e, \Delta_h) = \text{const}$ ; заштрихована область отрицательного значения  $\alpha_{Cu}$

Несколько иная ситуация наблюдается в системе 1–2–3 при изменении  $\delta$ . В этом случае увеличение  $\delta$  сопровождается и заметным изменением  $\bar{\Delta}$ , что и выводит систему в режим отрицательного изотоп-эффекта по меди ( $\alpha_{Cu} < 0$ ).

Практическое отсутствие изотоп-эффекта в  $YBa_2Cu_{3-x}Zn_xO_{7-\delta}$  в широком интервале изменения  $T_c$  при сохранении такой важной характеристики оптимизированного состава как минимальная ширина сверхпроводящего перехода [6] согласуется с представлениями о влиянии  $Zn^{2+}$  на разрушение ян-теллеровских центров в  $CuO_2$ -плоскостях с образованием крупных двумерных областей сильно неоднородной несверхпроводящей фазы, сопровождаемое понижением  $T_c$  перколяционной природы. При этом замещение  $^{16}O \rightarrow ^{18}O$  практически не сказывается на изменении электронных свойств  $CuO_2$ -плоскостей, находящихся в оптимизированном состоянии, за исключением области малых  $T_c$ , где в силу перколяционного характера перехода роль даже малых флуктуаций резко возрастает.





**Рис. 5.** Теоретические и экспериментальные результаты для кислородного  $\alpha_O$  (сплошные кривые) и медного  $\alpha_{Cu}$  (пунктир) показателей изотоп-эффекта в зависимости от приведенной температуры сверхпроводящего перехода  $T_c/T_c^{max} (\equiv K_{eh})$ . Сплошные и пунктирные линии — теоретические кривые, соответствующие сечениям 1, 2, 3 плоскости  $(\Delta_e, \Delta_h)$  (рис. 2а, 4б, 4в). Экспериментальные значения показателя изотоп-эффекта приведены для систем на основе  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ :  $\Delta$  —  $\alpha_{Cu}$  для  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [11],  $\diamond$  —  $\alpha_O$  для  $YBa_2Cu_{3-x}Zn_xO_{7-\delta}$  [6],  $\nabla$  —  $\alpha_O$  для  $Y_{0.8-y}Pr_{0.2}Ca_yBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [6],  $\circ$  —  $\alpha_O$  для  $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  [6],  $\square$  —  $\alpha_O$  для  $YBa_{2-x}La_xCu_3O_{7-\delta}$  [14]

Данные рис. 5 убедительно свидетельствуют в пользу возможностей количественного описания довольно тонких особенностей изотоп-эффекта по кислороду и меди в медь-кислородных ВТСП. Вместе с тем это всего лишь один небольшой пример, иллюстрирующий возможности модели полярных центров в объяснении и предсказании физических явлений и свойств.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что модель полярных ян-теллеровских центров позволяет не только просто и наглядно описать все, даже самые экзотические качественные особенности изотоп-эффекта в медных оксидах, но и объяснить различные количественные закономерности.

В целом экспериментальные данные исследования изотоп-эффекта в медных оксидах служат ярким подтверждением справедливости модели полярных ян-теллеровских центров, причем не только в общих чертах, но и в деталях. Так, например, обнаружение изотоп-эффекта по меди практически однозначно указывает на активную роль единственной гибридной  $Cu-O$ -моды  $Q_{eu}$  локальных смещений  $CuO_4$ -кластеров, что, в свою очередь, указывает на активную роль электронного  $E_u$ -терма.

Результаты работы иллюстрируют широкие возможности модели полярных ян-теллеровских центров не только в объяснении определенных физических свойств медных оксидов, но и в предсказании особенностей физического поведения. Прежде всего

речь идет о существовании так называемых оптимизированных составов с уникальным набором физических свойств (максимальные  $T_c$ , максимально узкие сверхпроводящие переходы, максимальная устойчивость к различным внешним воздействиям — дефектности, механическим напряжениям и т. д.). В этой же связи отметим особую роль давления как экспериментального метода, позволяющего наиболее широко исследовать локальные характеристики фактора вибронной редукиции и определить перспективы повышения  $T_c$  в конкретном «неоптимизированном» составе.

В заключение отметим, что для иллюстрации выводов теории нами были выбраны системы на основе  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ , где имеется достаточно большой объем экспериментальных данных. К сожалению, исследования изотоп-эффекта в другой популярной ВТСП-системе  $La_{2-x}M_xCuO_4$  ( $M = Ba, Ca, Sr$ ) менее представительны, хотя здесь обнаружен ряд интересных эффектов (большие значения  $\alpha_0$ , сильное влияние  $3d$ -замещений [15]), заслуживающих отдельного рассмотрения.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов № a1394, p459 фонда ISSEP.

## Литература

1. А. С. Москвин, Письма в ЖЭТФ **58**, 342 (1993).
2. А. С. Москвин, *Природа необычного физического поведения медных оксидов*, Препринт, Екатеринбург, УрГУ (1995).
3. А. С. Москвин, Н. Н. Лошкарева, Ю. П. Сухоруков и др., ЖЭТФ **105**, 967 (1994).
4. J. H. Nickel, D. E. Morris, and J. W. Ager III, Phys. Rev. Lett. **70**, 81 (1993).
5. D. Zech, H. Keller, K. A. Muller et al., Physica C **235-240**, 1221 (1994); Nature **371**, 681 (1994).
6. G. Soerensen and S. Gyga, Phys. Rev. B **51**, 11848 (1995).
7. Э. А. Пашицкий, ФНТ **21**, № 10, 995 (1995); № 11, 1091 (1995).
8. V. Z. Kresin and S. A. Wolf, Phys. Rev. B **49**, 3652 (1994).
9. Y. Bar-Yam, Phys. Rev. B **43**, 359 (1991).
10. F. Onufrieva and J. Rossat-Mignod, Phys. Rev. B **52**, 7572 (1995).
11. J. P. Franck and D. D. Lawrie, Physica C **235-240**, 1503 (1994).
12. И. Б. Берсукер, В. З. Полингер, *Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах*, Наука, Москва (1983).
13. R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 113 (1990).
14. H. J. Bornemann and D. E. Morris, Phys. Rev. B **44**, 5322 (1991).
15. N. A. Babushkina et al., Physica C **235-240**, 845 (1994).