

## TOTAL HEP ON COPPER NUCLEI DETERMINED BY THE NQR METHOD IN HTSC LATTICES

To'rayev E. Y.

Shaymardonova S. Y.

### SUMMARY

The method of the Messbauer emission spectroscopy on the Ba-133 isotope, the parameters of the electric field gradient (EFG) tensor are determined.

It is established that the discrepancy between the experimental and calculated values of  $e_{\text{кр}}$  is explained by the imperfection of the models used to calculate  $e_{\text{кр}}$ .

**Keywords:** electric field gradient, tensor, frame, nuclear quadrupole resonance, isotope, the waking nucleus, spin, spectrum, quadrupole splitting, asymmetry parameters, experimental value, semiconductor, superconductor.

### АННОТАЦИЯ

Методом эмиссионной Мессбауэровской спектроскопии на изотопе Ba – 133 определен параметры тензора градиента электрического поля (ГЭП).

Установлена, что расхождение экспериментальных и расчетных значений  $e_{\text{кр}}$  объясняется несовершенством моделей, используемых для расчета  $e_{\text{кр}}$ .

**Ключевые слова:** градиент электрического поля, тензор, решетка, ядерный квадрупольный резонанс, изотоп, возбужденное ядро, спин, спектр, квадрупольное расщепление, параметры асимметрии, экспериментальное значение, полупроводник, сверхпроводник.

### INTRODUCTION

Одна из основных в физике ВТСП-проблема определения места локализации дырок, которые и определяют явление сверхпроводимости. Наиболее надежным способом идентификации дырок в решетках ВТСП считается сравнение экспериментально определенных параметров тензора градиента электрического поля (ГЭП) с результатами их теоретического расчета. Этот способ наиболее эффективен при измерении и расчете параметров тензора ГЭП все ВТСП, как правило, содержат медь, а параметры тензора ГЭП в узлах меди наиболее чувствительны к зарядам атомных центров.

Настоящая работа посвящена рассмотрению экспериментальных и теоретических результатов определения параметров тензора ГЭП в узлах меди керамики  $\text{UBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . Соединение относится к числу наиболее типичных ВТСП и отличается относительной простотой синтеза, высокими значениями температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$  и возможностью регулирования  $T_c$  с помощью изменения  $x$  [1]. Именно эти особенности объясняют то, что подавляющее число исследований по сопоставлению расчетных и экспериментальных параметров тензора ГЭП относится к  $\text{UBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ .

**РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ТЕНЗОРА ГЭП**

Диагонализированный тензор ГЭП описывается тремя компонентами  $V_{xx}$ ,  $V_{yy}$ , и  $V_{zz}$ , связанными уравнением Лапласа

$$V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0(1)$$

И специальным выбором осей:

$$|V_{xx}| \leq |V_{yy}| \leq |V_{zz}|.(2)$$

В результате остается два независимых параметра: главная компонента тензора ГЭП  $e_q = V_{zz}$  и параметр асимметрии  $\eta = (V_{xx} - V_{yy}) / V_{zz}$ .

Есть два источника ГЭП на исследуемом ядре окружающие ионы кристаллической решетки  $e_{кр}$  и несферические валентные электроны атома  $e_{вал}$ :

$$q = (1 - \gamma)q_{кр} + (1 - R)q_{вал}(3)$$

где  $\gamma$ ,  $R$  – коэффициенты Штернхеймера, учитывающие экранирование (антиэкранирование) ГЭП от ионов и валентных электронов электронами внутренних оболочек атома.

Расчет параметров тензора ГЭП от ионов кристаллической решетки может быть проведен в рамках модели точечных зарядов.

Для керамики  $UBa_2Cu_3O_{7-x}$  такие расчеты были проведены в [2-3].

В табл. 1 сведены наиболее типичные результаты для двух моделей распределения зарядов атомных центров в решетках  $UBa_2Cu_3O_7$  и  $UBa_2Cu_3O_6$ . Отметим, во –первых удовлетворительное согласие данных, полученных разными авторами, и, во – вторых, очевидную зависимость параметров тензора ГЭП в узлах меди от распределения зарядов атомных центров.

**Экспериментальные методы определения параметров тензора ГЭП.** Наиболее полная экспериментальная информация о параметрах тензора ГЭП может быть получена методами ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) и мессбауэровской спектроскопии. Указанные методы основаны на взаимодействии квадрупольного момента ядра  $eQ$  с неоднородным электрическим полем.

Таблица 1. Параметры тензора ГЭП в узлах меди для  $UBa_2Cu_3O_7$  и  $UBa_2Cu_3O_6$ . (результаты расчета в рамках модели точечных зарядов )

Модель	$e_{кр}(1),$ $e/\text{Å}^3$	$\eta(1)$	$e_{кр}(2),$ $e/\text{Å}^3$	$\eta(2)$	Данные
$U^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^{3+}Cu(2)_2^{2+}O_7^{2-}$	+1,162	0,40	+0,700	0,13	[1, 2]
	+1,165	0,40	+0,701	0,12	[3]
	+1,146	0,35	+0,662	0,11	[4]
	+1,147	0,36	+0,663	0,10	[5]
$U^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^+Cu(2)_2^{3+}O_7^{2-}$	+0,979	0,08	+0,510	0,13	[5]
	+0,997	0,02	+0,552	0,16	[1, 2]
$U^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^{3+}Cu(2)_2^{2+}O_6^{2-}$	-1,286	0,00	+0,683	0,00	[3]
	-1,256	0,00	+0,668	0,00	[1, 2]
	-1,324	0,00	+0,714	0,00	[6]
	-1,264	0,00	+0,654	0,12	[4]
$U^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^{3+}Cu(2)_2^+O_6^{2-}$	-1,570	0,00	+0,816	0,00	[1, 2]
	-1,589	0,00	+0,806	0,00	[4]

Для  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  ядерный квадрупольный резонанс может наблюдаться на изотопах  $^{63}Cu$  и  $^{65}Cu$ . Для обоих изотопов  $I = 3/2$ , квадрупольные моменты  $Q(^{63}Cu) = -0,211$  б и  $Q(^{65}Cu) = -0,195$  б [4].

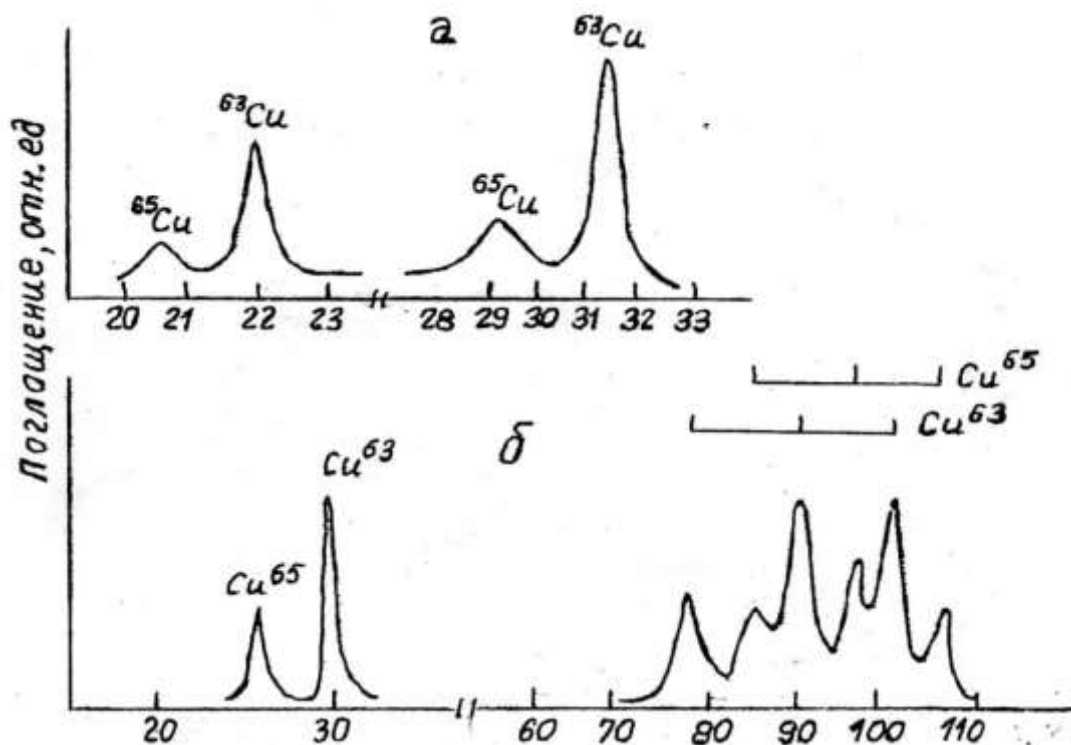


Рис.1. Спектр ЯКР $^{63,65}$  в  $YBa_2Cu_3O_7$  при 1,7 К[6] (а) и 4,2 К[7] (б).

При рассмотрении спектров ЯКР на изотопах  $^{63,65}Cu$  в  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  следует иметь в виду, что в структуре этого соединения медь занимает два положения  $Cu(1)$  и  $Cu(2)$ . Кроме того, следует учитывать, что в природной смеси изотопов находятся  $^{63}Cu$  и  $^{65}Cu$ . Поэтому в спектрах ЯКР  $^{63,65}Cu$  керамики  $YBa_2Cu_3O_x$  следовало ожидать четыре линии:  $^{63}Cu(1)$ ,  $^{65}Cu(1)$ ,  $^{63}Cu(2)$  и  $^{65}Cu(2)$ , причем интенсивности этих линий должны определяться заселенностью позиций  $Cu(1)$ ,  $Cu(2)$  (1:2) и содержанием изотопов  $^{63}Cu$  (~70%) и  $^{65}Cu$  (~30%). Действительно (см. рис. 1, а), спектр ЯКР  $^{63,65}Cu$  образца  $YBa_2Cu_3O_7$  состоит из двух пар линий, положение которых определено в большом числе работ [5, 6, 7-8]: 20,5; 22,05 и 29,2; 31,50 МГц. Исходя из величин квадрупольных моментов ядер  $^{63}Cu$  и  $^{65}Cu$ , и содержания этих изотопов в природной смеси изотопов менее интенсивные линии в этих парах (20,5 и 29,2 МГц) относятся к изотопу  $^{65}Cu$ , а более интенсивные (22,05 и 31,50 МГц). В дальнейшем будем рассматривать только спектр ЯКР на изотопе  $^{63}Cu$  как более интенсивный.

Таким образом, спектр ЯКР  $^{63}Cu$  в  $YBa_2Cu_3O_7$  состоит из двух линий: менее интенсивной (22,05 МГц) и более интенсивной (31,50 МГц).

Спектры ЯКР  $^{63,65}Cu$  в  $YBa_2Cu_3O_7$  (рис. 1, б) были исследованы в [9, 10,]. Две линии в области 26 -30 МГц относятся к чисто квадрупольному спектру на изотопах  $^{63,65}Cu$  для центров  $Cu(1)$ , тогда как шесть линий в области 60-120 МГц относятся к спектру ЯМР  $^{63,65}Cu$  во внутреннем магнитном поле для центров  $Cu(2)$  (напомним, что соединение

$YBa_2Cu_3O_6$  является антиферромагнетиком, причем магнитно упорядочена только подрешетка Cu (2).

Данные ЯКР  $^{63}\text{Cu}$  позволяют определить суммарный ГЭП на ядрах  $^{63}\text{Cu}$ , тогда как данные мессбуэровской спектроскопии на изотопе  $^{67}\text{Cu}$  ( $^{67}\text{Zn}$ ) позволяют определить вклад в ГЭП суммарный ГЭП от ионов кристаллической решетки в узлах меди. Очевидно, сопоставление данных двух методов позволяет в принципе оценить валентный вклад в ГЭП на ядрах  $^{63}\text{Cu}$ . Так, для решетки  $YBa_2Cu_3O_7$  в позиции Cu(1) имеем  $(1-R)e^2q_{\text{вал}}Q = 100,1 \pm 1,6$  МГц и в позиции Cu(2)  $(1-R)e^2q_{\text{вал}}Q = 99,4 \pm 1,0$  МГц. Близость вкладов от валентных электронов в суммарный ГЭП на ядрах  $^{63}\text{Cu}$  в позициях Cu(1) и Cu(2) свидетельствует о близости электронных структур этих центров. Значение  $(1-R)e^2q_{\text{вал}}Q = 100$  МГц может быть получено и для центров меди в соединении  $La_2CuO_4$  [10], где медь заведомо двухвалентна  $Cu_2^+$ . Следовательно, и в  $YBa_2Cu_3O_7$  центры Cu(1) и Cu(2) также двухвалентны.

Таким образом, метод ЯКР на изотопах  $^{63,65}\text{Cu}$  позволяет экспериментально определить суммарный ГЭП на ядрах  $^{63,65}\text{Cu}$  в решетках ВТСП и вследствие этого отсутствует, как правило, возможность сопоставления экспериментальных и расчетных (по модели точечных зарядов) параметров тензора ГЭП.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Warren W., Walstedt R. E. .et. al // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 1860.
2. Mali M., Brinkmann D. .et. al // Phys. Lett. A. 1987. V. 124. P. 112.
3. Матухин В. Л. И др. // Сверхпроводимость. 1990. Т. 3. В.208.
4. Любутин И.С. и др. // Сверхпроводимость. 1990. Т. 95. С. 1908.
5. Серегин П.П., Серегин Н.П. и др. // Сверхпроводимость. 1991. Т. 4. В.5.
6. Тураев Н. Ю., Тураев Э. Ю. и др. // Докл. Ан УзССР. 1991.
7. Мастеров В. Ф., Серегин П. П. и др. // Сверхпроводимость. 1990. Т. 3. С.449.
8. Серегин П.П., и др. // ПисьмаЖЭТФ. 1990. Т. 51. С. 593.
9. Тураев Н. Ю. и др. // Докл. Ан УзССР. 1991.
10. Насреддинов Ф.С., Серегин П.П. и др. // ЖЭТФ. 1991. Т.99. В.3. С.1026.
11. 1991. Т.99. В.3. С.1026.