

05.4

Параметр порядка атомов кислорода и сверхпроводимость соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

© Е.М. Гололобов

Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси, Минск

Поступило в Редакцию 28 декабря 1999 г.

На основании исследований орторомбичности составов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ определены значения параметра дальнего порядка атомов кислорода в базисной плоскости кристаллической решетки исследованных составов. Установлено, что T_c более чувствительна к изменению параметра порядка, чем к изменению $(7 - \delta)$.

Одной из важнейших проблем высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) является повышение сверхпроводящих свойств материалов. Значение сверхпроводящей критической температуры (T_c) высокотемпературных сверхпроводников $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ определяется в основном количеством атомов кислорода $(7 - \delta)$ и их упорядочением в кристаллической решетке при образовании орторомбической структуры. Для характеристики сверхпроводящих свойств состава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ обычно используют значение $(7 - \delta)$. Из множества теоретических и экспериментальных работ известно, что T_c определяется и упорядочением атомов кислорода в базисной плоскости (110) в цепочках $\dots -\text{Cu}-\text{O}-\text{Cu}-\dots$ в направлении оси b элементарной ячейки. Однако параметр дальнего порядка и его количественное значение в практику структурных исследований ВТСП не введены.

Целью настоящего исследования является определение и введение в практику рентгеновских исследований структурного состояния решетки составов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ параметра дальнего порядка (η) атомов кислорода в базисной плоскости (110).

Из теоретического исследования [1] следует, что орторомбичность (Δ) состава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ не только определяется разностью параметров a и b решетки, но и практически является линейной функцией параметра дальнего порядка атомов кислорода в базисной плоскости

| t, h | T_c, K | $7 - \delta$ | $C, \text{Å}$ | $\Delta, \text{Å}$ | η | $I(00.11)$ |
|--------|----------|--------------|---------------|--------------------|--------|------------|
| 0 | 88.7 | 6.88 | 11.6985 | 0.0680 | 0.436 | 300 |
| 20 | 90.4 | 6.90 | 11.6930 | 0.0685 | 0.439 | 320 |
| 63 | 91.5 | 6.92 | 11.6900 | 0.0690 | 0.442 | 333 |
| 110 | 92.1 | 6.93 | 11.6845 | 0.0700 | 0.449 | 340 |
| 170 | 92.3 | 6.94 | 11.6780 | 0.0745 | 0.477 | 348 |
| 300 | 92.5 | 6.94 | 11.6755 | 0.0750 | 0.481 | 354 |

(110), т.е. $\Delta(\eta) = b - a = \gamma\eta$. Откуда следует, что $\eta = \Delta/\gamma$, где γ — коэффициент, который можно определить экспериментально из максимального значения $\Delta_{\max} = (b - a)_{\max} = 0.0780 \text{ Å}$ для стехиометрического состава $YBa_2Cu_3O_7$. В этом соединении половина кислородных вакансий в базисной плоскости заняты атомами кислорода и $\eta_{\max} = 0.5$, что соответствует полному упорядочению — все вакансии в направлении оси b заняты атомами кислорода. Находим $\gamma = \Delta_{\max}/\eta_{\max} = 0.156$.

Для экспериментальных исследований использовались монокристаллические образцы $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, выращенные методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава, впоследствии подвергнутые при фиксированном давлении кислорода изотермическому отжигу в течение разного времени (t), после чего их закаляли в той же атмосфере кислорода при комнатной температуре.

Температура сверхпроводящего перехода определялась магнитным методом с точностью $\pm 0.1 \text{ K}$.

Рентгеновские исследования проводились на дифрактометре ДРОН-3 с использованием CuK_α излучения. В образцах примесных фаз не обнаружено. Параметры решетки a , b и c определялись асимметричным методом, используя рефлексы 10.11, 01.11 и 00.11 с точностью $\pm 0.0005 \text{ Å}$. Содержание кислорода ($7 - \delta$) в решетке $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ определялось методом интерполяции кривых зависимостей параметра решетки c от ($7 - \delta$) и T_c от ($7 - \delta$) из работы [2]. Определены относительные интегральные интенсивности рефлекса 00.11 ($I(00.11)$) для всех образцов.

В таблице приведены результаты исследования структурного состояния кристаллической решетки монокристаллических образцов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$.

Как видно из таблицы, при приближении к насыщению решетки состава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ атомами кислорода, T_c более чувствительна к изменению параметра дальнего порядка, чем к изменению количества кислорода в элементарной ячейке. Интегральные интенсивности рефлекса 00.11 повышаются с увеличением параметра η , что указывает на определенную зависимость интегральной интенсивности рентгеновских рефлексов от параметра дальнего порядка атомов кислорода в решетке соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

Автор благодарен Н.А. Каланде за предоставление образцов для проведения рентгеновских исследований.

Список литературы

- [1] *Khachatryan A.G., Morris J.W.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 24. P. 2776–2779.
- [2] *Cava R.J., Batlogg B., Chen C.H. et al.* // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 10. P. 5719–5722.