

محاسبه تراکم حفره ها در ابرساناهای $RE_{1-x}Pr_x-123$ ($RE=Y, Nd$) به روش جمع ظرفیت (BVS) پیوندها

قریانی، شعبان رضا

گرروه فیزیک؛ دانشگاه تربیت معلم سبزوار؛ سبزوار؛ صندوق پستی ۴۹۷

چکیده

تراکم حفره ها در صفحات CuO_2 و زنجیره های CuO_x در ابرساناهای $RE_{1-x}Pr_x-123$ ($RE=Y, Nd$) با استفاده از روش جمع ظرفیت پیوندها (BVS) محاسبه شد. نتایج نشان می دهد که با افزایش مقدار الایش Pr تراکم حفره ها کاهش میابد. انتقال بار بین صفحات و زنجیره ها صورت نمی گیرد. بنابر این نتایج فوق پیشنهاد می کند که کاهش حفره های متحرک در صفحات ناشی از جایگزینی شدن آنها در محل یونهای RE است.

Calculation of Hole concentrations in $RE_{1-x}Pr_x-123$ ($RE=Y, Nd$) Superconductors by bond valence sums method

Ghorbani S.R.

Department of Physics, Sabzevar Teacher Training University, P.O. Box 397, Sabzevar, Iran,

Abstract

The hole concentrations in the CuO_2 planes and CuO_x chains of $RE_{1-x}Pr_x-123$ ($RE=Y, Nd$) was calculated by bond valence sums (BVS) method. Results were shown that hole concentrations were decreased by increasing Pr doping. Since charge transfer between chain and plane does not take place therefore these results supposed that the concentration of mobile holes in the planes decreases due to localization on RE sites.
PACS No. 74.00, 70.00, 61.12

است [۲] از مقدار صفر در $T_c=0/05$ به یک مقدار بیشینه در $p=0/05$ این مقدار p می رسد و سپس در $p=0/27$ مجدداً به صفر نزول می کند [۳].

یک رهیافت مهم جهت درک نقش الایش و تغییرات دمای بحرانی در نمونه های آلاییده استفاده از محاسبات جمع ظرفیت پیوندها (BVS) است. در این کار محاسبات BVS براساس نتایج منتشر شده برای فواصل بین یونی حاصل از پراش نوترون در مرجع [۴] برای $RE_{1-x}Pr_x-123$ و مرجع [۵] برای $Nd_{1-x}Pr_x-123$ انجام و سپس با استفاده از نتایج فوق تراکم حفره ها در صفحات CuO_x و زنجیره های CuO_2 تعیین و در دو آئیاز فوق با هم مقایسه می شود.

روش محاسبه

در روش BVS ظرفیت یک اتم بین پیوندهای تشکیل دهنده آن

مقدمه

تحقیقات زیادی روی خواص حالت عادی و ابرسانایی -۱۳۲- ی جهت روش شدن مکانیزم های از بین برنده ابرسانایی انجام گرفته است. این تحقیقات نشان داد که جانشینی کردن عناصر خاکی نادر RE بجز Pr در مکان Y تاثیری روی خواص ابرسانایی ندارد. اما جانشینی Pr در مکان RE در ترکیبات $E=Y, Nd$ ($RE_{1-x}Pr_x-123$) $RE_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ کاهش سریع دمای بحرانی ابرسانایی T_c و از بین رفت ابرسانایی در مقادیر x بزرگتر از یک، مقدار بحرانی T_c می شود که مقدار آن به یون RE بستگی دارد. مقادیر x برای Y و Nd بترتیب برابر ۰/۶۷ و ۰/۳۲ است [۱].

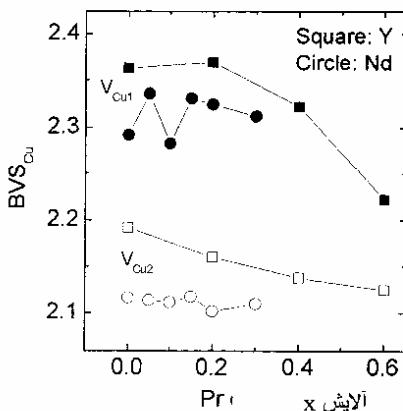
در ابرساناهای دمای بحرانی بالا و بستگی تنگاتنگی بین دمای بحرانی T_c و تراکم حفره ها p در صفحات CuO_2 مشاهده شده

که در آن V_{B1} و V_{B2} به ترتیب BVS اتمهای راچ در صفحات CuO_x زنجیره های CuO_2 هستند و n_{O1} کسر اشغال در مکان O_1 است.

در محاسبات BVS یونهای اکسیژن ظرفیت Pr^{+4} برای $x \leq 0.15$ [۸] و $+3$ جهت سایر مقادیر آلایش در نظر گرفته شده است.

نتایج و تحلیل داده ها

شکل ۱ نتایج محاسبات BVS را برای اتمهای من راچ در صفحات CuO_2 زنجیره های CuO_x را در ابررساناهای $\text{RE}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ با $\text{RE}=\text{Y}, \text{Nd}$ نشان می دهد.



شکل ۱: نتایج BVS یونهای من راچ در صفحه $\text{Cu}_2, \text{CuO}_2$.

این نتایج نشان می دهد که ظرفیت های Cu_1 و Cu_2 برای هر دو پایه Y و Nd در مقادیر آلایش Pr کمتر از 0.20 تقریباً ثابت است، ولی برای سایر Xها بستگی به پایه ها Y و Nd دارد.

در شکل ۲ تراکم حفره ها در صفحات CuO_2 و V_{Pl} زنجیره های CuO_x بر حسب مقادیر آلایش Pr نشان داده شده اند. وایستگی تراکم حفره ها در هر دو سیستم تقریباً یکسان است و با افزایش مقادیر آلایش هر دو پارامتر V_{Ch} و V_{Pl} کاهش میابند. در نتیجه تراکم کل حفره های که برابر با مجموع

توضیح می شود. BVS اتم A م بصورت زیر است:

$$V_i = \sum s = \sum \exp[(R_0 - R_i)/0.37] \quad (1)$$

که در آن S ظرفیت هر پیوند R_{ij} فاصله بین یون A و همسایه j است. طول یک پیوند از ظرفیت واحد است [۹] که برای یونهای $\text{Cu}^{+2}, \text{Cu}^{+1}, \text{Pr}^{+3}, \text{Pr}^{+4}$ مقدار آن از مرجع [۶] برای سایر اتمها بجز Pr^{+4} مقدار آن از مرجع [۶] گرفته شده است. R_0 برای پاروش بکار گرفته شده در مرجع [۶] محاسبه شد و برابر 1.679 \AA است. BVS یون مس از Pr^{+4} محاسبه شد و برابر 1.54 \AA است. BVS روایت پیشنهاد شده در مرجع [۶] به صورت زیر محاسبه گردید:

$$V_{\text{Co}} = (3V_2 - 2V_3)/(V_2 + 1 - V_3)$$

$$\text{اگر } V_2 < 2 \text{ و } V_2 > 2 \text{ آنکه } V_{\text{Co}} = (V_2 - 2V_1)/(V_2 - 1 - V_1) \text{ برای BVS مقادیر } \text{Cu}^{+2}, \text{Cu}^{+1}, \text{Pr}^{+3}, \text{Pr}^{+4} \text{ به ترتیب مطابق با } V_3, V_2, V_1 \text{ هستند. برای } \text{Pr}^{+4} \text{ از رابطه } V_{\text{Pr}} = (4V_3 - 3V_4)/(V_3 + 1 - V_4) \text{ استفاده شد. که در آن } V_3 \text{ و } V_4 \text{ مقادیر } \text{Pr}^{+3} \text{ و } \text{Pr}^{+4} \text{ برای BVS محاسبه شدند.}$$

اکسیژن در پیوندهای $\text{Pr}-\text{O}$ و $\text{Cu}-\text{O}$ با در نظر گرفتن یونهای $\text{Cu}^{+2}, \text{Cu}^{+1}, \text{Pr}^{+3}, \text{Pr}^{+4}$ به صورت زیر محاسبه شد: $s(\text{Cu}) = s(\text{Cu}^{+3})(V_{\text{Cu}} - 2) + s(\text{Cu}^{+2})(3 - V_{\text{Cu}})$ $V_2 > 2$ و $s(\text{Cu}) = s(\text{Cu}^{+2})(V_{\text{Cu}} - 1) + s(\text{Cu}^{+1})(2 - V_{\text{Cu}})$ $V_2 < 2$ و $s(\text{Pr}) = s(\text{Pr}^{+4})(V_{\text{Pr}} - 3) + s(\text{Pr}^{+3})(3 - V_{\text{Pr}})$. جهت محاسبه BVS اکسیژن $s(\text{RE}) = s(\text{RE})n_{\text{RE}} + s(\text{Pr})n_{\text{Pr}}$ در پیوند RE-O از رابطه استفاده شد. که در آن n_A کسر اشغال اتم A در مکان عناصر خاکی نادر است.

تراکم حفره ها در صفحات CuO_2 و V_{Pl} و زنجیره های CuO_x و V_{Ch} و همچنین ارجمنی توزیع حفره ها در محل اکسیژن، از روابط زیر محاسبه شدند [۶, ۸]:

$$V_{\text{Pl}} = 2 + V_{\text{Cu}2} - V_{\text{O}2} - V_{\text{O}3} \quad (2)$$

$$V_{\text{Ch}} = V_{\text{Cu}1} - V_{\text{O}1}n_{\text{O}1} - V_{\text{O}5}n_{\text{O}5}$$

$$V_{+} = 6 - V_{\text{Cu}2} - V_{\text{O}2} - V_{\text{O}3}$$

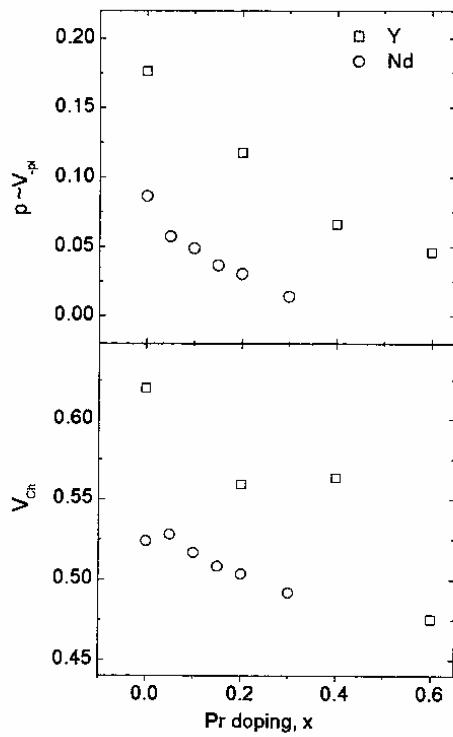
نیز کاهش یافته و وقتی که تمام حفره های متحرک داخل صفحات جایگزیده شوند ابررسانایی نیز در این دو آبیار از بین می رود.

مپاسگزاری

از حمایت‌های مالی دانشگاه تربیت معلم سیزده، آذانس تحقیقاتی و تتسک پرودت (VR) و برنامه اکسید کشور سوند نیز تقدیردانی می شود.

مرجع ها

- [۱] Y. Xu, W. Guan, "Ion-size effect on T_c in $(R_{1-x}Pr_x)Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ systems (R =Nd, Eu, Gd, Dy, Y, Er, and Yb)", Phys. Rev. B 45, (1992), 3176.
- [۲] B. Batlogg, H. Y. Hwang, H. Takagi, R. J. Cava, and H. L. Kao, "Normal state phase diagram of $(La,Sr)_2 CuO_4$ from charge and spin dynamics"; Physica C 235-240, (1994), 130.
- [۳] M. R. Presland, J. I. Tallon, R. G. Buckley, R. S. Liu, and N. F. Flower, "General trends in oxygen stoichiometry effects on T_c in Bi and Tl superconductors"; Physica C 176, (1991), 95.
- [۴] J. J. Neumeier, T. Björnholm, M. B. Maple, J. J. Rhyne, and J. A. Gottaas, "Neutron diffraction study of Pr valence and oxygen ordering in the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ system"; Physica C 166, (1990), 191.
- [۵] S. R. Ghorbani, M. Andersson, and Ö. Rapp, "Thermoelectric power of charge-neutral $Nd_{1-x}Ca_x M_x Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ (M =Tb and Pr); Evidence for different types of localization"; Phys. Rev. B 66, (2002), 104519.
- [۶] I. D. Brown and D. Altermatt, "Bond-valence parameters obtained from a systematic analysis of the inorganic crystal structure database"; Acta Crystallogr. B 41, (1985), 244.
- [۷] I. D. Brown, Solid State Chem. 82, (1989), 122.
- [۸] P. Lundqvist, C. Tengroth, Ö. Rapp, R. Tengren, and Z. Hegedüs, "Neutron-diffraction studies and interatomic distances in Ca-Pr doped $NdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ "; Physica C, 269 (1996), 231.



شکل ۲ : تراکم حفره هادر صفحه $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{CuO}_2$

حفره های داخل صفحه نیز کاهش می بد در نتیجه هیچ گزنه انتقال باری بین صفحات و زنجیره ها صورت نمی گیرد. علاوه بر این با افزایش مقدار Pr ارجاعیت توزیع حفره ها در محل اکسیژن، V_+ در ابررسانایی $Y_{1-x}\text{Pr}_x\text{-}123$ تقریبا ثابت و در $Nd_{1-x}\text{Pr}_x\text{-}123$ کاهش میابد. بنابر این کاهش حفره های متحرک در صفحات ناشی از جایگزیده شدن حفره ها در محل عنصر خاکی نادر RE است. لذا در اثر کاهش تراکم حفره ها دمای بحرانی T_c