

## Kinetics of Oxygen in High-Temperature Superconductors

Masataka Ohkubo

## 1. はじめに

YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> (YBCO) の超伝導特性が酸素量  $x$  に敏感であることは、よく知られている。現在、その超伝導転移温度  $T_c$  は、単純に酸素量だけに依存するのではなく、ミクロな酸素構造の影響を受けることが明らかにされつつある。

酸素量  $x$  は、特定の結晶面 ( $ab$  面に平行な CuO<sub>x-6.0</sub> 面) の酸素サイトの占有率によって決まる。この結晶面での酸素オーダリングを理論的に研究する手段として、2次元格子ガスモデルが用いられている<sup>1)</sup>。しかし、粒子数を固定した計算が行われることが多く、熱平衡酸素量を決めている酸素圧と温度を定量的に扱った計算が行われていない。そこで、格子ガスモデルを拡張し、周囲とエネルギー・粒子数を交換できる系を考えた。その結果、熱平衡酸素量の酸素圧と温度依存性 ( $x$ - $P$ - $T$  曲線) を理論的に再現することができた。

## 2. 計算方法

格子ガスモデルのハミルトニアンを次式で表す<sup>2)</sup>。

$$H = -V_1 \sum_{ij} n_i n_j - V_2 \sum_{ij} n_i n_j - V_3 \sum_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \dots \dots \dots (1)$$

$V_1, V_2, V_3$ : 酸素間の相互作用の強さ

$\mu$ : 酸素の化学ポテンシャル

$n_i$ : 酸素サイトの占有変数 (占有=1, 非占有=0)

計算は、約  $100 \times 100 \text{Å}^2$  の CuO<sub>x-6.0</sub> 面で行った。この系を、種々の温度と酸素圧下に置いて、式(1)の安定な状態を、モンテカルロ法により求めた。

## 3. 結果

Fig. 1に、 $V_1 = -0.376 \text{eV}$ ,  $V_2 = 0.131 \text{eV}$ ,  $V_3 = -0.120 \text{eV}$  の場合の平衡酸素量  $x$  の計算値と実験値<sup>3,4)</sup>を示す。計算値は実験値によく合っていることがわかる。したがって、式(1)は、YBCOの  $x$ - $P$ - $T$  曲線を記述する良いモデルであると言える。Fig. 2は、酸素配置の例である。 $ab$  軸が入れ換わったマイクロドメインが現れている。

## 4. おわりに

酸素オーダリングが長距離のコヒーレンシーをもっている場合には、回折実験で検出可能である。しかし、Fig. 2のようなミクロな酸素オーダリングを、実験的に調べるのは難しく、理論計算が適している。既存の高温超伝導体を理解することは、さらに  $T_c$  を上げて応用範囲を広げるために、是非とも必要である。

## 参考文献

- 1) de Fontaine, D., et al. : Phys. Rev., B36 (1987), 5709
- 2) Ohkubo, M. : Solid State Commun., 81 (1992), 537
- 3) Yamaguchi, S., et al. : Jpn. J. Appl. Phys., 27 (1988), L179
- 4) Lindemer, T. B., et al. : J. Am. Ceram. Soc., 72 (1989), 1775

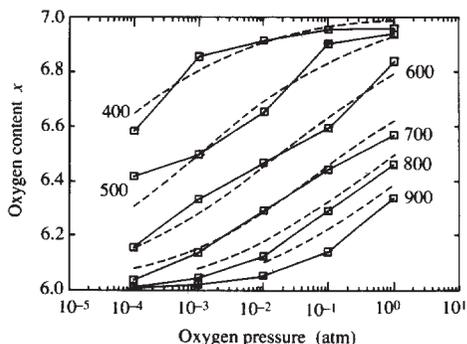


Fig. 1 Comparison of  $x$ - $P$ - $T$  curves of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> between experiment<sup>3,4)</sup> and the present calculations based on the lattice gas model;  $\square$ : calculations,  $---$ : experiment. The numbers indicate temperatures in K.

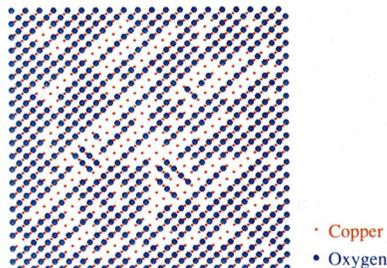


Fig. 2 An example of oxygen configuration on the CuO<sub>x-6.0</sub> plane. Microdomains are clearly observable by a glancing view.