

第一原理計算を用いた $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ における酸素空孔エネルギーの評価First principle calculation of oxygen vacancy formation energy in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

九州工業大学 ○堀出 朋哉, 松本 要

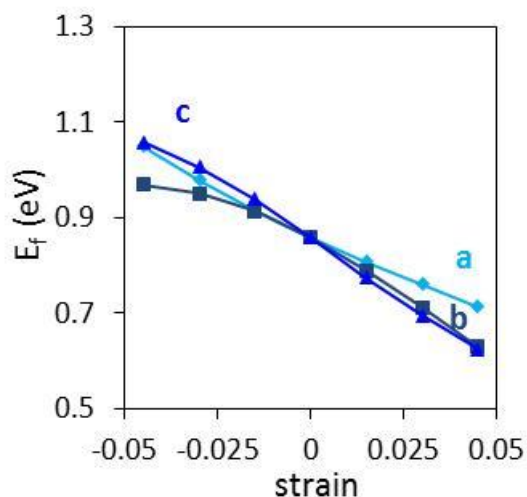
Kyushu Institute of Technology ○Tomoya Horide, Kaname Matsumoto

E-mail: horide@post.matsc.kyutech.ac.jp

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (YBCO)線材では小傾角粒界が完全に除去されているわけではなく、また磁束ピンニング制御のために Ba 酸化物ナノロッドが導入される。小傾角粒界や Ba 酸化物/YBCO 界面には高濃度の酸素空孔が導入されている可能性があり、このような酸素空孔の局所的挙動が臨界電流密度特性を決定していると考えられる。バルクレベルでは YBCO の酸素制御は十分に行われているが、局所的なレベルで酸素空孔の挙動が十分に理解されているとは言えない。粒界や界面にはひずみが導入されており、酸素空孔の局所的挙動を理解するにはまず酸素空孔形成のひずみ依存性を理解する必要があると考えられる。しかしこのような観点から YBCO の酸素挙動は研究されてこなかった。

そこで本研究ではひずみを有する YBCO において第一原理計算(VASP)により酸素空孔形成エネルギー(E_f)を計算した。2×2×1 及び 3×3×1 スーパーセルを用い、PAW(projector augmented wave) 法と GGA (Generalized gradient approximation)-PBE (Perdew-Bruke-Erzerhof)交換相関汎関数を用いて全エネルギー計算を行った。YBCO において構造緩和を行った後、格子定数を固定して CuO 鎖から 1 つ酸素原子を取り除いた。また構造緩和により得られた格子定数を変化させそれぞれの方向にひずみを与え同様の計算を行った。 E_f は $E_f = E(\text{Y}_4\text{Ba}_8\text{Cu}_{12}\text{O}_{27}) + 1/2E(\text{O}_2) - E(4(\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7))$ により求め、 E_f のひずみ依存性を議論した。

図に YBCO の a, b, c それぞれの軸に一軸ひずみを与えたときの E_f のひずみ依存性を示す。すべての軸においてひずみの増加とともに E_f は減少した。また圧縮ひずみでは b 軸ひずみの時 E_f がもっとも小さくなったが、引っ張りひずみでは a 軸ひずみにより E_f が最も大きくなった。これらの違いは CuO 鎖における O の結合と周りの原子の格子緩和の違いによる。ひずみにより酸素空孔濃度が増加するのは引っ張りひずみの時であり、 c 軸や b 軸の引っ張りひずみを避けたひずみ分布を設計することにより粒界や界面において酸素空孔の局所的導入が抑制される。講演では E_f 決定機構を解析するとともに、ひずみ設計についても議論する。

Figure Strain dependence of E_f in YBCO.