

YBCO 薄膜中ナノロッド周辺の結晶欠陥および歪みの可視化

Visualization of crystalline defects and strain field surrounding nanorods in YBCO film

九工大工 山本 浩貴, 堀出 朋哉, 山根 正博, ○松本 要

Kyushu Inst. Tech. Hiroki Yamamoto, Tomoya Horide, Masahiro Yamane, Kaname Matsumoto

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

Y 系超伝導線材の開発が進んでいるが、線材の I_c および J_c 向上においては YBCO 薄膜中へのピン止め導入が重要である。ピン止め点としては、絶縁体である $BaZrO_3$ (BZO) や $BaSnO_3$ (BSO) からなるナノロッド導入が現在でも盛んに研究されている。しかし従来のナノロッド研究は、ナノロッド物質・ドーパ量・薄膜作製条件等を変数とし、 J_c 特性と TEM による微細組織観察をからめた実験的検討にとどまっていた。数 10 nm $\sim\mu$ m スケールのピン止め点の空間分布と J_c に基づいて、原子レベル情報を粗視化したセミマクロなピン止め有効理論を議論することは有意義ではあるが、より定量的な議論にはナノロッド/YBCO 界面近傍の原子レベル $\sim$ 数 10 nm スケールの結晶欠陥や歪み分布のミクロ情報を取り込んだ理論・モデルの構築が必要である。さらに界面近傍のミクロ情報はナノロッド形成機構の解明においても重要であり、材料科学的観点から詳しく調べる必要がある。最近の収差補正 TEM/STEM 技術の進展は結晶欠陥や異相界面の原子レベルからの直接観察を可能としつつある。また最新の第一原理計算や分子動力学 (MD) 法等の計算アプローチも定量的なミクロ情報を得るために有力なツールになりつつある。本研究では局所的なピン止め評価やナノ組織形成機構解明を目指し、大規模な MD 計算を用いてナノロッド/YBCO 界面のミクロ情報を得ることを目的とした。MD 計算は実際の YBCO 薄膜成膜条件である温度 1000 K, 圧力 0.26 mbar に設定し、10000 step の計算を実行して求めた。まず、単体の BSO および YBCO の原子間ポテンシャルパラメータを格子定数や弾性定数が再現するように最適化を行った。ここで酸素欠損量と格子定数は Jorgensen の実験結果¹⁾に従った。その後ミスフィット歪が最小となるように unit cell 数を調節しながら (001), (010) 及び (110) の結晶面から構成される 3 種類の BSO ナノロッド/YBCO 界面構造モデルを作成した。図 1 にその構造モデルを示す。このとき BSO の体積分率を一定とした。BSO と YBCO は固溶体を作らないので、BSO ナノロッド/YBCO 系においては組織形成に伴う過剰エネルギー (界面エネルギー, 歪みエネルギー, 種々の欠陥形成エネルギー)

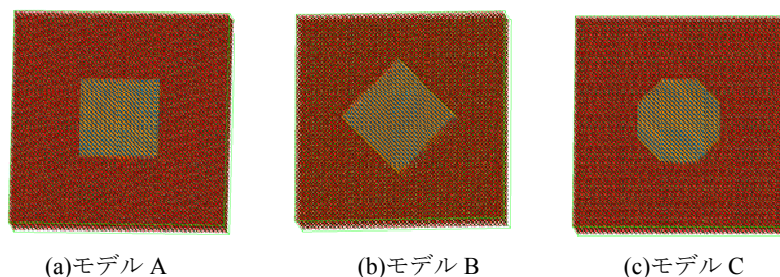


図 1 MD 計算に用いた BSO ナノロッド/YBCO 界面構造モデル

が生ずるが、これは MD 計算によって評価できる。その結果、過剰エネルギーはモデル A で 2.272 J/m³, モデル B で 2.650 J/m³, モデル C で 0.681 J/m³ となった。詳細については当日報告する。

参考文献 1) J.D.Jorgensen et al., Phys. Rev. B36, 3608(1987).