

第一原理計算を用いた YBCO における積層欠陥の構造および形成機構の解析

Analysis of structure and formation mechanism of stacking fault in YBCO films

using density functional theory calculation

九工大工¹, °堀出 朋哉¹, 松本 要¹,

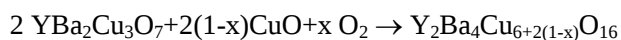
Kyushu Inst. Technol.¹, °Tomoya Horide¹, Kaname Mastumoto¹

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

ナノロッドやナノ粒子の導入により YBa₂Cu₃O₇(YBCO)薄膜の臨界電流密度(J_c)の向上が行われてきた。ナノロッドやナノ粒子に関しては添加材料や成膜条件の最適化が行われ、構造に対する理解や高度な構造制御が進められてきた。ナノロッドやナノ粒子などに関してはナノスケール構造に対する研究が主に進められているが、今後は原子スケールの構造に対する研究も行っていく必要があると考えられる。例えばナノロッドを導入した YBCO 薄膜において、ひずみ、界面構造、界面欠陥が解析され、超伝導特性に影響する可能性が指摘されている。積層欠陥も原子スケールの構造(欠陥)であり、ピンニングセンターとして機能することが知られている。金属有機化合物分解法を用いてナノ粒子導入 YBCO 薄膜では積層欠陥がピンニングセンターとして機能している。またパルスレーザー蒸着で作製したナノロッドを導入した YBCO 薄膜においても積層欠陥が J_c 特性に及ぼす影響が指摘された。しかし YBCO 薄膜における積層欠陥の構造や形成過程は理解されていない。原子スケール構造に関して構造や形成機構を議論していくには第一原理計算を用いた解析が有効である。本研究では積層欠陥に注目し、第一原理計算を用いてエネルギー計算を行い、積層欠陥の構造と形成機構の議論を行った。

第一原理計算は Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP)を用いて行った。計算モデルは YBCO/CuO/YBCO/CuO の 2×2×1 スーパーセルを用いた。YBCO 薄膜で報告されている積層欠陥形成過程を考えると、積層欠陥形成時に Cu 欠損ができる可能性がある。そこで積層欠陥を構成する CuO 鎖に Cu 空孔を導入して構造の安定性を議論した。

以下のような化学反応を想定して積層欠陥エネルギー(積層欠陥形成によるエネルギー変化)を計算した。



その結果、Cu 欠損量(x)が増加するとともに積層欠陥形成エネルギーが増加した。これは化学量論組成の Y₂Ba₄Cu₆O₁₆(124 相)が安定であることから妥当な結果である。しかし薄膜において Cu 量を十分に供給できない場合は Cu 欠損が形成される。当日は計算結果をもとにこのようなタイプの積層欠陥形成の可能性を議論する。

謝辞 本研究は科研費基盤研究(B) (18H01478) による支援を受けた。