

## ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА В $YBa_2Cu_3O_x$

*В.М. Аржавитин*

*Национальный научный центр “Харьковский физико-технический институт”,  
г. Харьков, Украина; E-mail: arzhavitin@kipt.kharkov.ua*

Энергия активации диффузии анионов слабосвязанного кислорода в сверхпроводящем соединении  $YBa_2Cu_3O_x$  при температурах 200...400 °С зависит от содержания кислорода ( $6,2 \leq x \leq 6,95$ ). Она описывается функцией  $U_{ox}(x)$  с максимумом при  $x \approx 6,615$ . На величину этой энергии могут влиять дырочные заряды на кислороде (2р-дырки)  $YBa_2Cu_3O_x$ . Причём, имеют место корреляции вида  $U_{ox} \sim -dT_c/dx$  и  $U_{ox} \sim -dn/dx$  между энергией активации  $U_{ox}(x)$  и температурой сверхпроводящего перехода  $T_c(x)$ , концентрацией 2р-дырок  $n_{CuO_2}(x)$  в проводящих плоскостях  $Cu(2)O_2$ , плотностью 2р-дырок  $n(x)$  в  $YBa_2Cu_3O_x$ . Эти корреляции позволили получить зависимости  $n_{CuO_2}(x)$  и  $T_c/T_c^{max}(n)$  для  $YBa_2Cu_3O_x$  по данным измерений энергии активации  $U_{ox}(x)$  методом внутреннего трения.

### ВВЕДЕНИЕ

К одному из быстро развивающихся разделов физики твёрдого тела относятся исследования свойств материалов, содержащих ионы с переменной валентностью. Повышенный интерес к подобным соединениям вызван, прежде всего, открытием высокотемпературной сверхпроводимости в металлооксидных соединениях со структурой перовскита, в состав которых входят элементы с переменной валентностью, такие как медь, висмут, таллий, кислород. Наиболее подробно изучены физические свойства высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП)  $YBa_2Cu_3O_x$ . В зависимости от температуры и давления концентрация кислорода  $x$  в них может меняться от 6 до 7.

Металлооксидное соединение  $YBa_2Cu_3O_x$  уникально тем, что изменение концентрации слабосвязанного кислорода в его базисной плоскости  $Cu(1)O_{x-6}$  (рис. 1) немедленно приводит к изменению электрофизических свойств и кристаллической структуры соединения от тетрагонального (“tetra”) антиферромагнетика до орторомбического (“orto”) сверхпроводника [1]. Уже давно и закономерно сложилось мнение, что изучение аномального поведения ВТСП-структур в несверхпроводящем состоянии при температурах, превышающих критическую температуру, поможет ответить на вопрос о природе самого сверхпроводящего состояния [2].

Целью настоящей работы является численный анализ энергии активации диффузии слабосвязанного кислорода в соединении  $YBa_2Cu_3O_x$  при температурах 200...400 °С на основании опубликованных данных по внутреннему трению  $YBa_2Cu_3O_x$  в структурно различных состояниях. Предпочтение при отборе публикаций для такого анализа отдавалось тем из них, в которых описаны физические свойства образцов ВТСП, изготовленных путём закалки в жидкий азот от различных 900...50 °С температур отжига в окислительной атмосфере.

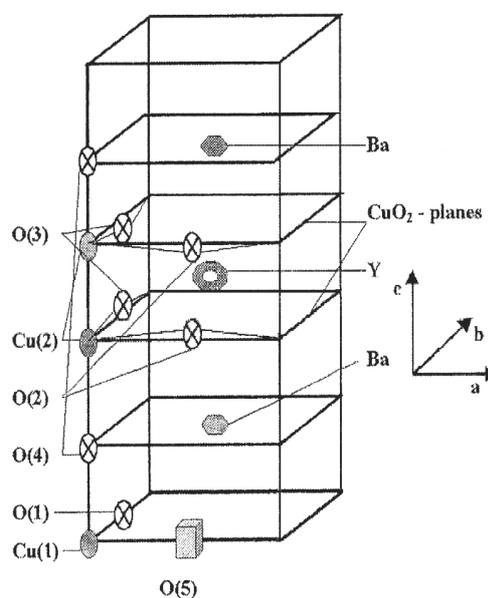


Рис. 1. Кристаллическая структура и расположение ионов в элементарной ячейке  $YBa_2Cu_3O_7$

### РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ДИФФУЗИИ СЛАБОСВЯЗАННОГО КИСЛОРОДА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Проблема диффузии слабосвязанного кислорода в  $YBa_2Cu_3O_x$  до сих пор привлекает внимание исследователей [3,4]. В работе [3] методом измерения комплексной магнитной восприимчивости изучались особенности диффузии слабосвязанного кислорода вблизи магнитных вихрей Абрикосова при низких температурах 70...92 К в облучённых электронами плёнках  $YBa_2Cu_3O_x$ . В работе [4] методом Монте-Карло моделировалась диффузия слабосвязанного кислорода в  $YBa_2Cu_3O_x$  при повышенных температурах 500, 650 и 800 °С. Рассмотрим теперь диффузию слабосвязанного кислорода при умеренных температурах 200...400 °С в различающихся

стартовым содержанием кислорода ( $6,2 \leq x \leq 6,95$ ) однофазных образцах  $YBa_2Cu_3O_x$ . По существующим представлениям в базисной плоскости  $Cu(1)O_{x-6}$  соединения  $YBa_2Cu_3O_x$  возможна микродиффузия слабосвязанного кислорода, которая происходит не из-за концентрационных неоднородностей по кислороду, а индуцируется внешними знакопеременными напряжениями ("диффузия под напряжением") [5]. Осциллирующая деформация решетки создает для слабосвязанного кислорода предпочтительные направления миграции по кислородным вакансиям таким образом, что диффузия анионов кислорода реализуется посредством их перескоков между позициями O1 и O5 в базисной плоскости  $Cu(1)O_{x-6}$  перовскитоподобной кристаллической решетки. Известен также альтернативный механизм "диффузии под напряжением" слабосвязанного кислорода в  $YBa_2Cu_3O_x$ , предполагающий, что вакансии образуют с анионами кислорода устойчивые гантельные пары O1–O5. Под воздействием осциллирующей нагрузки происходят скачкообразные повороты связанных пар "вакансия-кислород" в базисной плоскости относительно направления деформирования на межатомные расстояния [6].

С "диффузией под напряжением" слабосвязанного кислорода связаны релаксационные пики внутреннего трения, расположенные в температурном промежутке  $210 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_{ox} \leq 350 \text{ }^\circ\text{C}$  в зависимости от содержания кислорода  $x$  и частоты  $f \approx 1 \dots 100$  Гц деформирования  $YBa_2Cu_3O_x$  [6–10]. Зная температуру термоактивации слабосвязанного кислорода  $T_{ox}$  и частоту деформирования  $f$  по известной формуле Верта-Маркса [11] легко определить энергию  $U_{ox}$  активации диффузии этого кислорода.

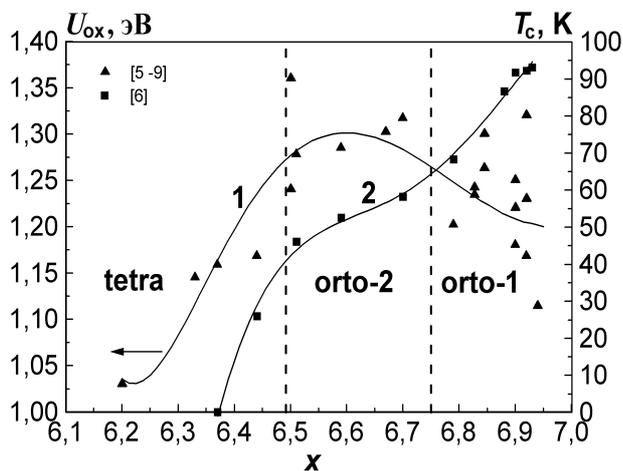


Рис. 2. Зависимости энергии активации  $U_{ox}$  диффузии слабосвязанного кислорода (1) и температуры  $T_c$  перехода в сверхпроводящее состояние (2) от концентрации кислорода  $x$ . Концентрационные границы (вертикали)  $x = 6,6 - 0,12$  и  $x = 6,6 + 0,15$  существования "orto-1", "orto-2" фаз проведены по полю рисунка на основании данных, заимствованных из работы [12]

Полученный таким образом массив статистически распределённых значений  $U_{ox}(x)$  методом наи-

меньших квадратов был аппроксимирован полиномом девятой степени (коэффициент множественной корреляции  $r = 0,793$ ). Этот полином (рис. 2, кр. 1) имеет выпуклую форму с координатой максимума  $x = 6,615$ . Коэффициент множественной корреляции считается малым, если  $r < 0,96$  [13]. Ввиду его малости ( $r = 0,793$ ) возникает вопрос об адекватности выбранного полинома средним значениям  $U_{ox}(x)$ .

Для решения этого вопроса дополнительно проведен рекомендуемый в [14] анализ остатков  $\Delta U_{ox}$ , т.е. разности между наблюдаемыми значениями и полученными по уравнению регрессии оценочными значениями  $U_{ox}$ . Анализируемые остатки  $\Delta U_{ox}$  распределились относительно нулевой линии  $\Delta U_{ox}=0$  симметричным и случайным образом по гауссову закону, и, следовательно, с математической точки зрения выбранный регрессионный полином (модель) адекватен средним значениям экспериментальных данных.

Факт уменьшения  $U_{ox}(x)$  с ростом кислородного индекса в интервале ( $6,615 \leq x \leq 6,95$ ) требует физического обоснования. С целью установления механизма, формирующего убывающую в направлении роста  $x$  ветвь  $U_{ox}(x)$ , рассмотрим изменение электрофизических свойств  $YBa_2Cu_3O_x$  вблизи максимума  $U_{ox}(x)$ . Именно вблизи  $x \approx 6,6$  вместо металлической  $R \sim T$  появляется полупроводниковый (активационный)  $dR/dT < 0$  ход зависимости электросопротивления от температуры [7] и характерное плато на концентрационной зависимости температуры  $T_c(x)$  перехода в состояние с высокотемпературной сверхпроводимостью (см. рис. 2, кр. 2). Появление на кривой  $T_c(x)$  плато с  $T_c \approx 60$  К коррелировано с появлением сверхструктуры "orto-2" (см. рис. 2). А полупроводниковая ветвь электросопротивления возникает при структурном превращении из "orto-2"-фазы в антиферромагнитную "tetra"-фазу с температурой Нееля, зависящей [15, 16] от числа дырок на кислороде в плоскостях  $Cu(2)O_2$  в пересчёте на элементарную ячейку  $YBa_2Cu_3O_x$  (концентрации дырок в плоскостях  $CuO_2$ ). Эти плоскости обеспечивают также металлическую проводимость и сверхпроводимость орторомбических модификаций  $YBa_2Cu_3O_x$ .

Наличие полупроводниковых и антиферромагнитных свойств у  $YBa_2Cu_3O_x$ , коррелированное со структурными перестройками, позволяет предположить, что выпуклость профиля энергии активации  $U_{ox}(x)$  обеспечивается одновременным с кислородным упорядочением образованием дырочных зарядов на кислороде в объёме элементарной ячейки  $YBa_2Cu_3O_x$ . Здесь дырки содержатся на кислороде (2p-дырки) и на меди (3d-дырки) либо только на меди в зависимости от концентрации кислорода [17,18]. Методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии 2p-дырки найдены [17,18] в базисных  $Cu(1)O_{x-6}$ , проводящих  $Cu(2)O_2$  плоскостях и на "мостиковом" кислороде (позиция O4) соединения  $YBa_2Cu_3O_x$ .

Общее число 2p-дырок на элементарную ячейку  $YBa_2Cu_3O_x$  (плотность 2p-дырок) обнаруживает нелинейную зависимость от  $x$  и слабую линейную зависимость от температуры  $T$  сверхпроводника [19].

Между плотностью 2р-дырок  $n(x)$  в  $YBa_2Cu_3O_x$  и температурой сверхпроводящего перехода  $T_c(x)$  в области её изменения тоже существует линейная корреляция [15]:

$$n(x) \sim A \cdot T_c(x), \quad [T_c] = K, \quad (1)$$

где  $A$  – переводной коэффициент с размерностью обратной температуры. Полагают [20], что отклонения от пропорциональности (1) обусловлены неточностью измерений  $n(x)$ . Корреляция, аналогичная (1), существует также между концентрацией 2р-дырок  $n_{CuO_2}(x)$  в проводящих плоскостях  $Cu(2)O_2$  и критической температурой  $T_c(x)$  [16,21].

Методом наименьших квадратов аппроксимируем "ступенчатую" функцию  $T_c(x)$  полиномом четвёртой степени (коэффициент множественной корреляции  $r = 0,998$ ) с последующим дифференцированием сглаживающего полинома. Оказалось, что полученная таким образом производная, взятая с обратным знаком  $-T_c(x)/dx$ , представляет собою выпуклую функцию от содержания кислорода с координатой максимума  $x = 6,695$  (рис. 3). Т.е., максимумы производной  $-dT_c(x)/dx$  (см. рис. 3) и энергии активации  $U_{ox}(x)$  (см. рис. 2, кр. 1) смещены относительно друг друга по концентрационной оси на  $\Delta x = 0,08$ . Концентрационные профили  $U_{ox}(x)$  и  $-dT_c(x)/dx$  топологически очень близки между собой, а между величинами  $U_{ox}(x - 0,08)$  и  $-dT_c(x)/dx$  имеет место линейная корреляция (см. рис. 3, врезка).

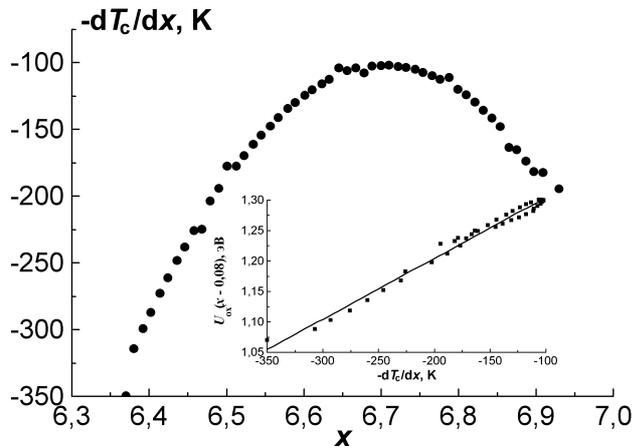


Рис.3. Производная  $-dT_c/dx$  от критической температуры по содержанию кислорода в  $YBa_2Cu_3O_x$ . Врезка: корреляция между величинами  $U_{ox}(x - 0,08)$  и  $-dT_c(x)/dx$  (коэффициент множественной корреляции  $r = 0,993$ )

Соответствующее уравнение линии регрессии имеет вид:

$$U_{ox}(x - 0,08) = 1,4136 - 0,00108 \frac{dT_c(x)}{dx}, \quad (2)$$

$$[U_{ox}] = \text{эВ}.$$

Поскольку  $[d(n/A)]/dx = dT_c/dx$ , то из (2) получим ещё три корреляции:

$$U_{ox}(x - 0,08) = 1,4136 - \frac{0,00108}{A} \frac{dn(x)}{dx}; \quad (3)$$

$$T_c(x) - T_c(6,37) = \frac{1}{0,00108} \int_{6,37}^x [1,4136 - U_{ox}(x - 0,08)] dx; \quad (4)$$

$$n(x) - n(6,37) = \frac{A}{0,00108} \int_{6,37}^x [1,4136 - U_{ox}(x - 0,08)] dx. \quad (5)$$

Корреляция (3) описывает искомое влияние плотности 2р-дырок  $n(x)$  на энергию  $U_{ox}(x)$  активации диффузии слабосвязанного кислорода. Корреляция (4) позволяет восстановить величину  $T_c(x)$  по экспериментально установленной методом внутреннего трения энергии активации  $U_{ox}(x)$ . Корреляция (5) позволяет восстановить плотность 2р-дырок  $n(x)$  в зависимости от содержания кислорода по величине энергии активации  $U_{ox}(x)$ . Численное интегрирование (4, 5) ведётся в области существования  $6,37 \leq x \leq 6,93$  "ступенчатой" функции  $T_c(x)$  (см. рис. 2, кр. 2). Следует отметить, что наряду с критерием максимальности величины коэффициента множественной корреляции  $r$  выбор степеней сглаживающих  $U_{ox}(x)$  и  $T_c(x)$  полиномов продиктован также предполагаемым существованием корреляций (2... 5). С позиций теории решения некорректных задач [22], к которым относятся задачи приближённого дифференцирования [23] типа (2,3), не рекомендуется использовать сглаживающие  $T_c(x)$  полиномы высоких порядков [11,23]. Поскольку же концентрационная зависимость активационной энергии используется в операциях интегрирования (4, 5), то увеличение степени сглаживающего полинома с целью повышения точности построения  $U_{ox}(x)$  целесообразно [11]. С другой стороны, выбор тех или иных аппроксимирующих результаты экспериментов функциональных зависимостей считается оправданным, если выбранные зависимости удовлетворяют требованию содержательности, иначе говоря, интерпретируемости на основе понятий решаемой задачи [13].

Корреляция (5) содержит неизвестный коэффициент  $A$ , который легко вычислить с помощью исходной корреляции (1). Чтобы выполнить подобное вычисление рассмотрим концентрацию 2р-дырок  $n_{CuO_2}(x)$  в проводящих плоскостях  $Cu(2)O_2$ . Следуя выводам работ [16,18,21], примем величину предельной концентрации дырок  $n_{CuO_2}(7) \approx n_{CuO_2}(6,93) = 0,5$  и вычислим значение коэффициента  $A \approx 0,00336$ . Затем интегрированием (5) найдём концентрацию дырок  $n_{CuO_2}(x)$ .

Оказалось (рис. 4), что расчётная зависимость  $n_{CuO_2}(x)$  в количественном отношении близка к измеренным при  $T = 295$  К методами неупругого рассеяния нейтронов [24], оптической спектроскопии [25] и рентгеновской абсорбционной спектроскопии [18] зависимостям концентрации 2р-дырок в плоскостях  $Cu(2)O_2$  от содержания кислорода.

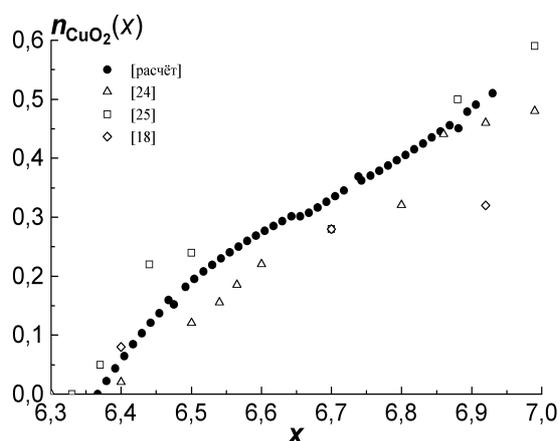


Рис. 4. Концентрация 2p-дырок  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  в проводящих плоскостях  $\text{Cu}(2)\text{O}_2$  соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$

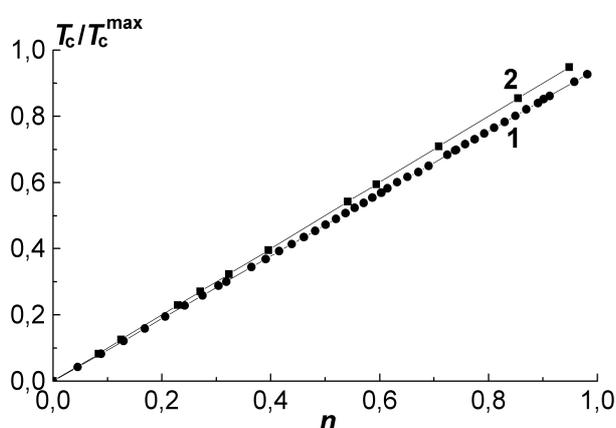


Рис. 5. Зависимость относительной температуры сверхпроводящего перехода соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  от величины плотности 2p-дырок в нём.

1 – по данным внутреннего трения; 2 – по данным, приведенным в работе [15]

С другой стороны при учёте всех мест расположения 2p-дырок их предельная плотность  $n(7)$  не превышает 0,84 [26], либо единицы [15,17,18,25,12]. Примем  $n(7) \approx n(6,93) = 1$  и рассчитаем по формулам (4, 5) относительную температуру  $T_c/T_c^{\text{max}}$  сверхпроводящего перехода  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  в функции плотности 2p-дырок  $n$ . Расхождение между рассчитанной таким образом и построенной по экспериментальным данным работы [15] линейными зависимостями  $T_c/T_c^{\text{max}}(n)$  весьма незначительно (рис. 5).

Хорошее количественное и качественное совпадение зависимостей  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  и  $T_c/T_c^{\text{max}}(n)$ , построенных по данным метода внутреннего трения и иных экспериментальных методов (см. рис. 4, 5), свидетельствует о возможном влиянии положительных дырочных зарядов на величину энергии активации диффузии отрицательно заряженных анионов слабо связанного кислорода.

## ВЫВОДЫ

Энергия активации  $U_{\text{ox}}$  диффузии анионов слабо связанного кислорода в соединении  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  при умеренных температурах 200...400 °С зависит от концентрации кислорода ( $6,2 \leq x \leq 6,95$ ) и представляет собою функцию с максимумом при  $x \approx 6,615$ . На величину этой энергии активации могут влиять дырочные заряды на кислороде  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.А.Финкель. Электропроводность керамических ВТСП  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с различным содержанием кислорода при низких температурах // *ФНТ*. 2002, т. 28, в. 8/9, с. 952–957.
2. В.И.Маслов. Наблюдение "гигантского" скачка тока полевой электронной эмиссии из высокотемпературных сверхпроводников // *Изв. вузов. Физика*. 2007, т. 50, № 5, с. 13–18.
3. В.О.Леденёв, Д.О.Леденёв, О.П.Леденёв. Особенности диффузии кислорода и его вакансий в сверхпроводящем соединении  $\text{YBaCuO}$  вблизи магнитных квантовых линий // *Вопросы атомной науки и техники. Серия "Вакуум, чистые металлы, сверхпроводники"*. 2006, № 1, с. 76–82.
4. М.З.Урицкий, В.И.Цидильковский. Подвижность и диффузия потоков кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ . Моделирование методом Монте-Карло. // *ФТТ*. 2003, т.45, в.6, с. 361–366.
5. Mi Y., Shaller R., Benoti W. Theoretical calculation of oxygen relaxation in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  ceramic // *Phys.Rev. B*. 1991, v. 44, p. 12575–12577.
6. J.R.Cost, J.T.Stanley. *Internal friction due to oxygen relaxation in superconducting  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$* . : Preprint LA-UR-90-1707. Los alamos national laboratory, 1990, 20 p.
7. В.М.Аржавитин, А.А.Блинкин, В.В.Деревянко, Ю.Ю.Раздовский, В.А.Финкель, Ю.Н.Шахов. Влияние слабо связанного кислорода на кристаллическую структуру, электрофизические и релаксационные свойства и сверхпроводимость ВТСП-керамик.  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  // *СФХТ*. 1993, т.6, №11–12, с. 2095–2103.
8. V.A.Finkel, V.M.Arzhavitin, A.A.Blinkin et al. The influence of weakly bonded oxygen on the crystal structure, electrical and relaxation properties of HTSC  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  ceramics // *Physica C*. 1994, v. 235–240, p. 303–304.
9. G.Cannelli, R.Cantelli, F.Cordero et al. Fast oxygen mobility in tetragonal  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  by anelastic relaxation measurements // *Solid State Commun.* 1991, v. 77, p. 429–434.
10. I.Bonetti, E.G.Campari, S.Mantovani. Off - stoichiometric superconducting phases, oxygen mobility and anelastic relaxation in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  // *Physica C*. 1992, v.196, p. 7–13.
11. С.А.Головин, А.Пушкар, Д.М.Левин. *Упругие и неупругие свойства конструкционных металлических материалов*. М.: "Металлургия". 1987, 190 с.
12. О.Е.Парфёнов. *Переход диэлектрик-металл и упорядочение кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$*  // Авто-

- реф. дис...канд. физ.-мат. наук. М.: ИАЭ. 1995, 20 с.
13. П.В.Новицкий, И.А.Зограф. *Оценка погрешностей результатов измерений*. Л.: "Энергоатомиздат", 1985, 248 с.
  14. Д.Химмельблау. *Анализ процессов статистическими методами*. М.: "Наука", 1973, 957 с.
  15. М.М.Богдан, А.С.Ковалёв. Магнитный фазовый переход и концентрация дырок в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  // *ФНТ*. 1990, т. 16, № 12, с. 1576–1583.
  16. Б.Я.Сухаревский, И.В.Вилков. Критическая температура и предельная концентрация носителей заряда в плоскостях  $\text{CuO}_2$  в медьсодержащих ВТСП // *ФНТ*. 1995, т. 21, № 9, с. 899–905.
  17. H.Tolentino, E.Dartyge, A.Fontaine et al. Valence changes of copper under oxygen uptake and removal in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  observed in situ by X-ray absorption spectroscopy // *Phys. Lett. A*. 1989, v. 139, № 9, p.474–480.
  18. H.Tolentino, F.Baudelet, A.Fontaine et al. Sequence and symmetry of hole injection in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ . In situ and ex situ experiments on powders and single crystals using X-ray absorption spectroscopy // *Physica C*. 1992, v.192, № ½, p.115–130.
  19. Ю.А.Гененко, Ю.М.Иванченко. *Нестехиометрический кислород как агент высокотемпературного спаривания*: Препринт ДонФТИ–89–2. Донецк, 1989, с. 7–8.
  20. B.Ya.Sukharevskii, I.V.Zhikharev, S.I.Khokhlova et al. Manifestation of the effect of atomic ordering on the characteristics of normal and superconducting of HTSC – oxides  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  // *Physica C*. 1992, v.194, p. 373–382.
  21. Б.Я.Сухаревский. Распределение дырок между плоскостями  $\text{CuO}_2$  и  $\text{CuO}_8$  соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  // *ФНТ*. 1994, т. 20, № 2, с. 120–123.
  22. В.С.Сизиков *Математические методы обработки результатов измерений*. СПб: "Политехника", 2001, 240 с.
  23. Л.В.Елохина, М.С.Дударев, В.В.Дякин и др. Вычисление концентрационной зависимости коэффициента взаимной диффузии в системе Pt–Pd по данным рентгеновского микроанализа // *ФММ*. 1987, т. 63, в. 6, с. 1174–1184.
  24. J.Rossat-Mignod, L.P.Regnault, P.Bourges et al. Inelastic neutron scattering study of the spin dynamics in the  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  system // *Physica C*. 1992, v.192, p. 109–121.
  25. A.Zibold, L.Widder, H.P.Geserich et al. Optical investigation of the metal-insulator transition regime in single-domain crystals of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  // *Physica C*. 1993, v. 212, p. 365–371.
  26. Е.Г. Максимов. Высокотемпературная сверхпроводимость сегодня // *УФН*. 2004, т. 174, № 9, с.1026–1027.

## ОСОБЛИВОСТІ ЕНЕРГІЇ АКТИВАЦІЇ ДИФУЗІЇ КИСНЮ В $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$

*В.М. Аржавітін*

Енергія активації дифузії аніонів кисню у надпровідному з'єднанні  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  при температурах 200...400 °С залежить від змісту кисню ( $6,2 \leq x \leq 6,95$ ). Вона описується функцією  $U_{\text{ox}}(x)$  з максимумом при  $x \approx 6,615$ . На величину цієї енергії можуть впливати діркові заряди на кисні (2р-дірки)  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ . Причому, мають місце кореляції виду  $U_{\text{ox}} \sim -dT_c/dx$  і  $U_{\text{ox}} \sim -dn/dx$  між енергією активації  $U_{\text{ox}}(x)$  і температурою надпровідного переходу  $T_c(x)$ , концентрацією 2р-дірок  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  у провідних площинах  $\text{Cu}(2)\text{O}_2$ , густиною 2р-дірок  $n(x)$  у  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ . Ці кореляції дозволили одержати залежності  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  і  $T_c/T_c^{\text{max}}(n)$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  за даними вимірів енергії активації  $U_{\text{ox}}(x)$  методом внутрішнього тертя.

## FEATURES OF ACTIVATION ENERGY OF OXYGEN DIFFUSION IN $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$

*V.M. Arzhavitin*

Activation energy of oxygen diffusion in superconducting compound  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  at temperatures 200...400 °С depends on the density of oxygen ( $6,2 \leq x \leq 6,95$ ). This energy is described by function  $U_{\text{ox}}(x)$  with maximum at  $x \approx 6,615$ . Hole charges of oxygen (2p-holes)  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  can influence on value of this energy. Correlations of kind  $U_{\text{ox}} \sim -dT_c/dx$  and  $U_{\text{ox}} \sim -dn/dx$  take place between activation energy  $U_{\text{ox}}(x)$ , temperature of superconducting transition  $T_c(x)$ , concentration 2p-holes  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  in conducting planes  $\text{Cu}(2)\text{O}_2$  and density 2p-holes  $n(x)$  in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ . These correlations allowed to find dependences  $n_{\text{CuO}_2}(x)$  and  $T_c/T_c^{\text{max}}(n)$  for  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  using value of activation energy  $U_{\text{ox}}(x)$  measured by method of internal friction.