

بررسی ابتدا به ساکن اثر افزونی پتاسیم در ساختارهای الکترونی و بلوری

نمونه ابررسانا $YBa_{2-x}K_xCu_3O_7$

مهناز محمدی*، بهرام خوشنویسان

دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

چکیده

در این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از روش امواج تخت و شبه پتانسیل، به بررسی اثرات جای گذاری پتاسیم در ترکیب $YBa_{2-x}K_xCu_3O_7$ با مقادیر ۰/۷۵، ۰/۲۵، ۰/۱۶، ۰/۱۰ و ۰/۰۰ پرداخته و ساختار الکترونی، سطوح انرژی و چگالی حالات (DOS) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) محاسبه شده است. با افزایش میزان پتاسیم تغییراتی در ساختار الکترونی و چگالی حالات‌های جزئی به وجود آمده است که در مقایسه با نتایج تجربی گزارش شده باید مسئول کاهش دمای گذار ابررسانایی با افزایش میزان پتاسیم باشد. همچنین نتایج محاسباتی تغییرات ثابت‌های شبکه (که با a ، b و c نشان داده می‌شوند) با مطالعات تجربی بر مبنای پالایش ریتولد نمایه‌های پراش اشعه X توافق خوبی نشان می‌دهد.

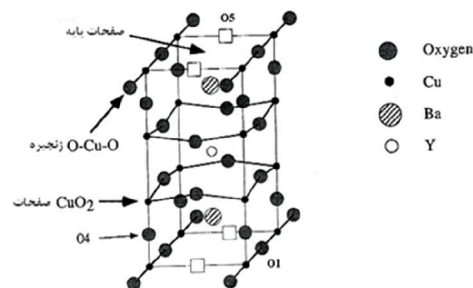
کلیدواژگان: ابررسانایی دمای بالا، محاسبات ابتدا به ساکن، آرایش پتاسیم، چگالی حالات جزئی

مقدمه

به طور کلی اعتقاد بر این است که ابرجریان در صفحات CuO_2 عمدتاً جاری می‌باشد، هر چند که وقوع ابررسانایی علاوه بر حضور این صفحات به چگونگی توزیع زنجیره‌های $Cu-O$ که به عنوان مخازن بار عمل کرده و موجب انتقال بار به صفحات می‌شوند نیز شدیداً بستگی دارد.

با توجه به گزارشات موجود دو عامل اساسی می‌تواند در چگالی حامل‌های بار در این صفحات (و در نتیجه دمای گذار) کاملاً مؤثر باشند، یکی نظم اکسیژن‌ها در صفحات پایه که به نوبه خود باعث تغییر چگالی حامل‌های بار در زنجیره‌های $Cu-O$ می‌شود و دیگری آرایش کاتیون که به وسیله آن معمولاً یک عنصر تک یا دو ظرفیتی جای‌گزين عنصر دو یا سه ظرفیتی شده و در این صورت تعداد یون‌های Cu^{+3} افزایش می‌یابد و لذا حفره‌ها به داخل صفحات CuO تزریق می‌شوند. با استفاده از قانون هوم-روتز برای انتخاب مناسب‌ترین عناصر برای جای‌گزینی، هم اکنون جای‌گزینی بسیاری

$YBCO$ اولین ابررسانا با دمای گذار بالاتر از نقطه جوش ازت مایع (77K) است و بدین لحاظ از جهات گوناگون مورد مطالعه قرار گرفته است. این ترکیب از نظر بلور شناختی دارای ساختار پرووسکایت و از نوع لایه‌ای می‌باشد. اتم‌های مس و اکسیژن به گونه‌ای کنار هم قرار گرفته‌اند که دو آرایش متفاوت یک بعدی (به صورت زنجیره‌های $Cu-O$) و دو بعدی (به صورت صفحات CuO_2) را به نمایش می‌گذارند (شکل ۱).



شکل ۱. ساختار ترکیب $YBCO$ [۱].

نظر گرفته می‌شوند و بسط نتایج چگالی حالات الکترونی آن‌ها برای زوج‌های کوپری (در فاز ابررسانا) غیرمستقیم و همانند با کارهای دیگران تا حدودی بر مبنای حدسیات علمی می‌باشد.

از آنجا که علی‌رغم وجود مطالعات ابتدا به ساکن بر روی جنبه‌های مختلف YBCO متأسفانه گزارشات در زمینه تأثیر آرایش پتاسیم تقریباً نایاب می‌باشد، لذا نتایج این کار محاسباتی به صورت قاطع فقط با نتایج تجربی در زمینه تغییرات پارامترهای ساختاری بلورهای آلاییده قابل مقایسه می‌باشد که در قسمت‌های بعدی بدان پرداخته می‌شود.

جدول ۱. گزارشات موجود جانشینی پتاسیم در ترکیب YBCO.

مرجع	توضیحات	منبع پتاسیم
[۴]	دمای بحرانی تا ۱۳۵ K افزایش یافته.	K ₂ CO ₃
[۵]	دمای بحرانی تا ۱۲۴ K افزایش یافته.	KOH
[۶]	دمای گذار تا ۸۶ K کاهش می‌یابد.	KNO ₃
[۷]	دمای گذار به ۹۶ K می‌رسد.	KCL
[۸]	با افزایش X از ۰.۲ تا ۰.۶ دمای گذار از ۹۴.۵ تا ۹۳.۸ K کاهش یافته و علاوه بر این رسانندگی دانه‌ها به صورت قابل توجهی افزایش یافته است.	KClO ₃
[۹]	با افزایش X از ۰ تا ۰.۵ دمای گذار از ۹۱ تا ۶۵ K کاهش یافته و با انجام مجدد فرآیند بازپخت دمای گذار تا ۹۳ K افزایش یافته.	K ₂ CO ₃
[۱۰]	افزایش پتاسیم تا X=۰.۴ تأثیری در خواص ساختاری ندارد و همچنین افزایش پتاسیم تا X=۰.۳ تأثیری در دمای گذار ندارد ولی دمای گذار از ساختار تتراگونال به اورتورمبیک به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد.	KC ₈ O ₄ H ₅
[۱۱]	به طور کلی دمای گذار در نمونه‌های آلاییده شده با KClO ₃ (۱۰۵ K) نسبت به نمونه‌های آلاییده شده با K ₂ CO ₃ بیشتر است.	KClO ₃ K ₂ CO ₃
[۱۲]	برای مقادیر X از ۰ تا ۰.۷۵ دمای گذار در تمام نمونه‌ها بالاتر از ۹۴ K گزارش شده. علاوه بر این پتاسیم در میکرو ساختارهای نمونه تأثیر گذاشته و رسانندگی دانه‌ها به صورت قابل توجهی افزایش یافته است.	KClO ₃
[۱۳]	دمای گذار در نمونه‌های آلاییده شده به صورت جزئی کاهش یافته و چگالی جریان بحرانی کاهش یافته است.	K ₂ CO ₃

از کاتیون‌ها در YBa₂Cu₃O₇ گزارش شده است [۲]. از طرف دیگر جای‌گزینی عناصر خاکی نادر به جای Y نشان داده که این جای‌گذاری نه تنها تأثیر چندانی در دمای گذار ندارد، بلکه ساختار بلوری را هم تغییر نمی‌دهد.

در این ترکیب به دلیل جایگاه‌های متفاوتی که برای اتم‌های Cu وجود دارد، جای‌گزینی عناصری مانند Co, Ga و مانند آن‌ها اثرات متفاوتی روی ابررسانایی داشته و بعضی از آن‌ها روی مقدار اکسیژن و نظم کوتاه برد لایه‌های Cu-O تأثیر دارند.

همچنین جانشینی پتاسیم به جای باریم گزارش شده است، که نزدیکی شعاع یونی پتاسیم (۱/۳۳Å) به باریم (۱/۳۵Å) این عمل را توجیه می‌نماید [۳]. این جانشینی توسط گروه‌های زیادی انجام شده است، گزارشات موجود در این زمینه متناقض می‌باشد (جدول ۱). در گزارشات داریم که T_c با افزایش میزان آرایش پتاسیم افزایش می‌یابد، حتی اگر منبع پتاسیم K₂CO₃ باشد دمای بحرانی تا ۱۳۵K هم می‌رسد، در حالی که اگر منبع پتاسیم KOH باشد دمای بحرانی فقط تا ۱۲۴ K افزایش می‌یابد. از طرف دیگر گروهی نیز گزارش کرده‌اند که در صورتی که منبع پتاسیم KNO₃ باشد T_c تا ۸۶K کاهش یافته همچنین اگر منبع پتاسیم KCL باشد دمای گذار به ۹۶K می‌رسد. در این زمینه گزارشات دیگری نیز موجود است که در جدول ۱ به صورت خلاصه نتایج آن‌ها ذکر شده است [۴-۱۳].

بنابراین با توجه به تعدد گزارشات مربوطه و نتایج بعضاً متفاوت آن‌ها و عدم بررسی سیستم ذکر شده با روش‌های نظری و محاسباتی مناسب، در این مقاله با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن به بررسی نقش آرایش پتاسیم در ساختارهای الکترونی و بلوری نمونه ذکر شده می‌پردازیم و همچنین نتایج محاسبات با نتایج تجربی مقایسه خواهند شد. اگر چه که در محاسبات ابتدا به ساکن الکترون‌ها در فاز نرمال برای سیستم در

روش و جزئیات محاسبه

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، با بهره‌گیری از کد محاسباتی PWscf و استفاده از شبه پتانسیل‌ها انجام شده و برای برهم‌کنش‌های تبدیلی-همبستگی نیز تقریب PBE-GGA اختیار گردیده است. روش انتخابی فوق در تأیید با گزارشات دیگران انتخاب شده که بسیاری از خواص YBCO را به‌خوبی به‌دست می‌دهد [۱۵-۱۴]. از طرف دیگر با توجه به کار دیگران شبه پتانسیل‌ها از نوع "فوق نرم" انتخاب و الکترون‌های لایه ظرفیت اتم‌های موجود در ترکیب به‌صورت جدول ۲ در نظر گرفته شده‌اند. به‌منظور آزمون صحت شبه پتانسیل‌ها و انتخاب درست آنها نتایج محاسبات در مورد ثابت‌های شبکه، چگالی حالت‌ها در سطح فرمی، ساختار نواری و چگالی حالت‌ها با نتایج حاصل از محاسبات با روش‌های پتانسیل کامل و شبه پتانسیل مقایسه شدند [۱۸-۱۶].

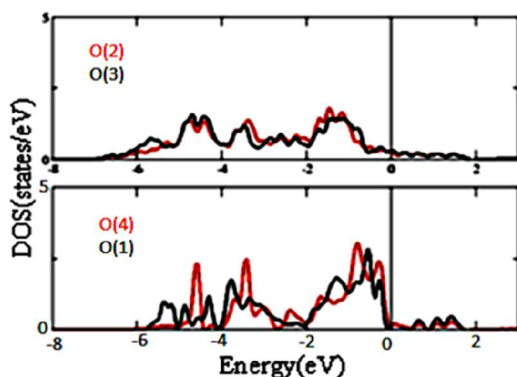
جدول ۲. الکترون‌های لایه ظرفیت اتم‌های موجود در ترکیب در شبه پتانسیل‌ها در نظر گرفته شده‌اند.

Y	$4s^2, 4p^6, 4d/5s^2, 5p^0$
Ba	$5s^2, 5p^6, 5d^0/6s^2, 6p^0$
Cu	$3d^{10}/4s^1, 4p^0$
O	$2s^2, 2p^4$
K	$4s^1, 4p^0$

انرژی قطع برای بسط چگالی الکترونی تا میزان Ry ۴۰۰ در نظر گرفته شده است [۱۸]. در محاسبات کلیه انتگرال‌گیری‌ها بر روی "ناحیه اول بریلوئن" و از طریق مش‌بندی آن توسط نقاط پر تقارن انجام می‌شود. این مش‌بندی به‌صورت مفروض در بسته نرم‌افزاری، بر اساس الگوریتم مونخورست-پک انجام گردیده [۱۹] و برای سیستم بدون آرایش به‌صورت $6 \times 6 \times 4$ در نظر گرفته شده است. در تمام محاسبات، شرط همگرایی انرژی کل تا مقادیر کمتر از 10^{-4} Ry انتخاب شده که در این صورت نیروی کل وارد بر اتم‌ها تا میزان Ry/a.u 10^{-3} کاهش می‌یابد.

به‌منظور بررسی اثرات جای‌گذاری پتاسیم در ترکیب $YBa_{2-x}K_xCu_3O_7$ میزان آلییدگی به‌صورت $x=0.16, 0.25, 0.5$ و 0.75 انتخاب شده تا با مقادیر تجربی آرایش در مراجع فوق‌الذکر قابل مقایسه باشند. مضافاً آنکه برای انجام محاسبات بر اساس مقادیر فوق نیاز به استفاده از ابریاخته می‌باشد و بنابراین افزایش حجم محاسبات نیز عامل دیگر محدود کننده در این شبیه‌سازی بوده است. برای $x=0.16$ یک ابریاخته به‌صورت $3a \times b \times c$ با 39 اتم و با مش‌بندی $2 \times 6 \times 4$ در منطقه اول بریلوئن و برای $x=0.25$ و 0.75 ابریاخته‌هایی به‌صورت $2a \times b \times c$ شامل 26 اتم و مش‌بندی $3 \times 6 \times 4$ در نظر گرفته شد. انرژی قطع برای بسط چگالی الکترونی همان مقدار 400 Ry در نظر گرفته شد زیرا با تکرار محاسبات برای ابرسلول $2a \times b \times c$ (با حضور ناخالصی و بدون آن) با انرژی قطع بزرگتر تغییر قابل ملاحظه‌ای در نتایج مشاهده نشد و از طرف دیگر لازم به‌ذکر است اگرچه که از ابریاخته در محاسبات استفاده شده اما به‌دلیل آنکه آرایش به‌صورت جانیشینی می‌باشد پس تقارن‌های سلول واحد تغییر زیادی نکرده و ضمناً در فضای وارون حجم بریلوئن ابریاخته شدیداً کاهش می‌یابد. در مورد $x=0.5$ ابتدا یک سلول واحد معمولی با جانیشینی یک اتم پتاسیم به‌جای باریم در نظر گرفته و انرژی کل سیستم محاسبه شد، ولی به‌دلیل حفظ تقارن روش دیگر آن بود که یک ابریاخته به ابعاد $2a \times b \times c$ در نظر گرفته شود به‌صورتی که دو اتم پتاسیم در یک سلول واحد به‌جای باریم قرار گیرند و در سلول مجاور جای‌گزینی صورت نگیرد بنابراین یک ابریاخته به‌صورت $2a \times b \times c$ با 26 اتم در نظر گرفته شد و انرژی کل سیستم در این حالت هم محاسبه شد. هرچند که در حالت ابریاخته انرژی کل سیستم به میزان 0.1 Ry از حالت جای‌گزینی تک سلولی کمتر است ولی نتایج تمام محاسبات از جمله ثابت‌های شبکه و فاصله بین

شکل ۳ چگالی حالات جزئی اتم‌های O(2) و O(3) را نشان می‌دهد که هر دو در صفحات CuO₂ تقریباً در شرایط یکسانی از همسایگی‌ها قرار دارند. این اتم‌ها دارای چگالی‌های تقریباً یکسانی در سطح فرمی هستند بنابراین کرنش ناشی از جذب اکسیژن در زنجیره‌های Cu-O تأثیر اندکی در ساختار الکترونی صفحات CuO₂ دارد زیرا تغییر محسوسی در ساختار الکترونی اتم‌های این صفحات ندارد. از طرفی چگالی حالات جزئی اتم‌های O(1) و O(4) دارای مؤلفه‌های بزرگی در نزدیکی سطح فرمی می‌باشند لذا می‌توان انتظار داشت که نظم اتم‌های O(1) در زنجیره‌های Cu-O و فاصله اتم‌های O(4) از صفحات پایه بر دمای گذار ابررسانایی تأثیرگذار باشد (زیرا در نظریه میکروسکوپیکی ابررساناهای فلزی T_c به چگالی حالات حامل‌ها در سطح فرمی بستگی دارد هرچند که استفاده از نظریه مذکور برای ابررساناهای اکسید مسی احتیاط زیادی می‌طلبد) [۲۱].



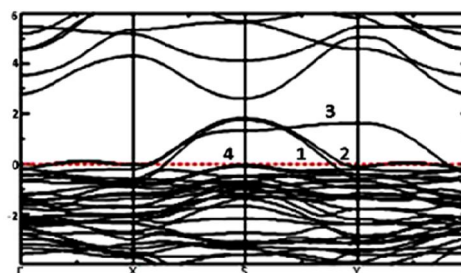
شکل ۳. چگالی حالات جزئی O(2), O(3), O(4), O(1) برای نمونه ناآلاییده (x=0).

جدول ۳ مقادیر چگالی حالات‌ها در انرژی فرمی $N(E_F)$ را نشان می‌دهد. مقدار چگالی حالات‌ها در انرژی فرمی مربوط به ترکیب ناآلاییده به میزان ۶ States/eV می‌باشد. مقدار $N(E_F)$ در مراجع مختلف در گستره ۲/۳ تا ۷ States/eV گزارش شده است [۲۳-۲۵]. همان‌طور که در جدول ۳ مشاهده می‌شود با افزایش

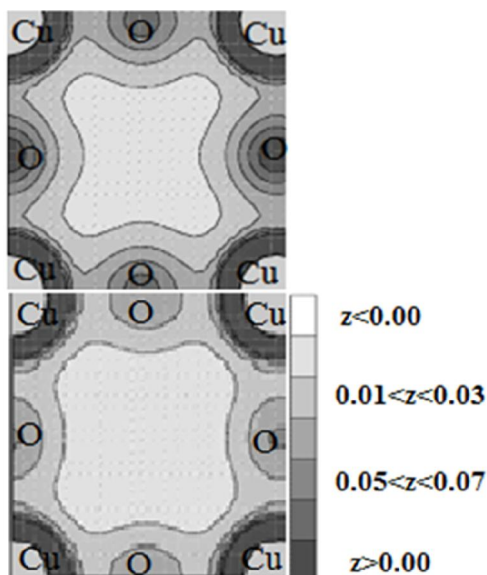
اتم‌ها با تقریب بسیار خوبی بر هم منطبق هستند بنابراین پیش‌بینی می‌شود که سیستم شامل ترکیبی از این دو حالت باشد. البته در ادامه فقط نتایج حالت ابریاخته برای آلاییدگی $x=0.5$ (به دلیل پایین‌تر بودن انرژی) ذکر شده است. لازم به ذکر است که تمام موارد مربوط به محاسبات ابریاخته‌ها نیز تحت واهلش قرار گرفته‌اند به‌گونه‌ای که نیروی کل وارد بر هر کدام از اتم‌ها تا 10^{-3} Ry/a.u کاهش یافته است.

بحث و نتیجه‌گیری

در این محاسبات برای ساختار تجربی بلور، گروه فضایی Pmmm که از اندازه‌گیری‌های پراش اشعه X به دست آمده بود در نظر گرفته شد. ثابت‌های شبکه و مکان‌های تعادلی اتم‌ها بهینه گردید که پارامترهای ساختاری محاسبه شده توافق خوبی با داده‌های تجربی ناشی از پالایش ریتولد داشتند [۲۰]. شکل ۲ ساختار نواری اسپین قطبیده نمونه بدون آلیش YBCO₇ را که محاسبه گردیده نشان می‌دهد. به دلیل آنکه ساختار غیر مغناطیسی است جداسدگی اسپینی وجود ندارد و همان‌طور که انتظار داریم ساختار نواری مربوط به اسپین بالا و پایین بر هم منطبق هستند. چهار نوار، دو نوار (نوار شماره ۱ و ۲) شامل اوربیتال‌های Cu₂(3d)-O₂(p)-O₃(p) و دو نوار دیگر (نوار شماره ۳ و ۴) شامل اوربیتال‌های Cu₁(1d)-O₁(p)-O₄(p) سطح فرمی را قطع می‌کنند که نتایج در توافق با دیگر گزارشات است [۲۱-۲۲].



شکل ۲. ساختار نواری YBCO₇ با انطباق کامل اسپین‌های بالا و پایین (انرژی فرمی معادل با صفر قرار داده شده است).



شکل ۴، چگالی الکترونی صفحه CuO_2 مربوط به $x=0.5$ (بالا) و چگالی الکترونی همان صفحه در ترکیب YBCO_7 (پایین). متغیر Z بیانگر چگالی الکترونی است که رنگ خاکستری تیره چگالی الکترونی بیشتر و رنگ خاکستری روشن چگالی الکترونی کمتر را نشان می‌دهند.

با توجه به نقش مهمی که اتم $\text{O}(1)$ در ابررسانایی سیستم YBCO دارد بررسی چگالی حالت‌های جزئی این اتم نشان می‌دهد که با افزایش میزان پتاسیم، چگالی حالت‌های جزئی این اتم در سطح فرمی افزایش یافته و به عبارت دیگر چگالی حفره‌ها در صفحات پایه کاهش یافته که این امر در چگالی بار صفحات CuO_2 مؤثر است (شکل ۵) [۲۷].

بررسی ساختار نواری مربوط به مقادیر آلیبدگی پتاسیم $x=0.16, 0.25, 0.5$ و 0.75 نشان می‌دهد که با افزایش مقدار آلیبدگی نواری سطح فرمی افزایش می‌یابد و برخلاف ساختار نواری نمونه ناآلیبدگی نواری مربوط به اسپین بالا و پایین بر هم منطبق نیستند بنابراین حضور ناخالصی پتاسیم در ترکیب باعث بروز خاصیت مغناطیسی در این سیستم می‌شود که متأسفانه نتایج مطالعات تجربی در این زمینه مسکوت می‌باشند.

مقدار آلیبدگی پتاسیم (x) چگالی حالت‌های الکترونی صفحات CuO_2 در انرژی فرمی (که از مجموع چگالی الکترونی اتم‌های موجود در این صفحه به دست می‌آید) افزایش یافته است و بنابراین با افزایش چگالی حالت‌های الکترونی، چگالی حفره‌ها در صفحات و در نتیجه دمای گذار ابررسانایی نیز کاهش می‌یابد (به دلیل آنکه در ابررساناهای اکسید مسی حفرات حامل ابر جریان در صفحات CuO_2 می‌باشند) که برخی از نتایج تجربی نیز مؤید این مطلب‌اند [۲۶].

جدول ۳. سطرهای اول و دوم بیانگر چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی $N(E_F)$ (States/eV) و چگالی حالت‌ها در صفحات CuO_2 بوده و سطر سوم نشانگر فاصله بین اتم‌های $\text{Cu}_1\text{-Cu}_2(\text{\AA})$ که همان فاصله میان صفحات CuO_2 و CuO است می‌باشد.

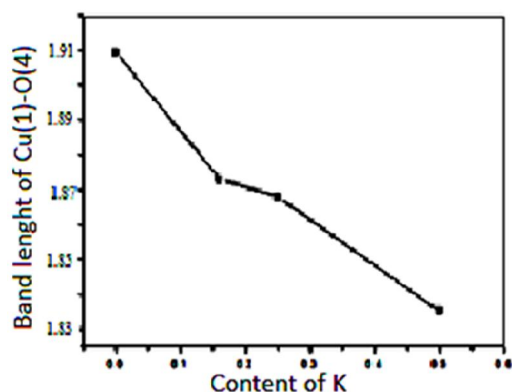
x	0	0.16	0.25	0.5	0.75
$N(E_F)$ (States/eV)	6	12.45	12.5	20	23
$N(\text{CuO}_2)$ (States/eV)	1.24	1.25	1.51	1.9	2.17
$\text{Cu}_1\text{-Cu}_2(\text{\AA})$	4.08	4.042	4.032	3.68	3.92

شکل ۴ چگالی الکترونی صفحه CuO_2 مربوط به $x=0.5$ و چگالی الکترونی همان صفحه را به ازای $x=0$ نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با ورود پتاسیم در ترکیب چگالی الکترونی در صفحه CuO_2 افزایش یافته است.

پتاسیم و هم‌پوشانی اوربیتال‌های d اتم مس با اوربیتال‌های s اتم پتاسیم است.

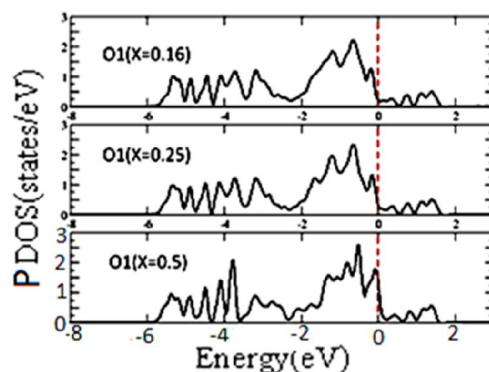
با بررسی موقعیت همه اتم‌ها در سلول واحد می‌توان اطلاعات مهمی از خواص ابررساناهای دمای بالا به دست آورد. از آنجا که گزارشات، همبستگی میان تغییرات دمای بحرانی و طول پیوند Cu(1)-O(4) و همچنین فاصله میان صفحات CuO₂ در فرآیند آرایش YBCO و تغییرات میزان اکسیژن را، نشان می‌دهند بنابراین در این قسمت به بررسی تغییرات ابعاد سلول واحد در حضور ناخالصی می‌پردازیم.

با زیاد شدن مقدار x متوسط فاصله بین صفحات CuO₂ افزایش یافته و از طرفی فاصله بین صفحات CuO₂ و صفحات پایه کاهش یافته که آنالیز ریتولد الگوهای پراش اشعه X نیز همین نتیجه را نشان می‌دهند. البته با کاهش فاصله این صفحات (صفحات پایه و CuO₂) فاصله اتم‌های Cu(1)-O(4) کاهش یافته بنابراین اتم‌های O(4) به صفحات Cu-O نزدیک شده که این نزدیکی تزریق حفره به صفحات CuO₂ را کاهش می‌دهد و موجب کاهش دمای گذار ابررسانایی می‌شود (شکل ۷) [۱۲].

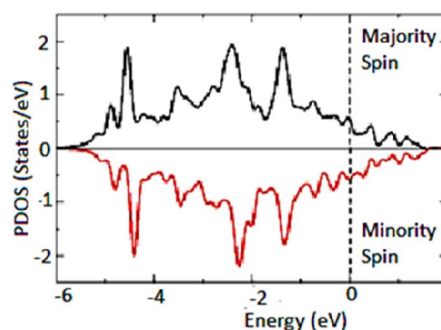
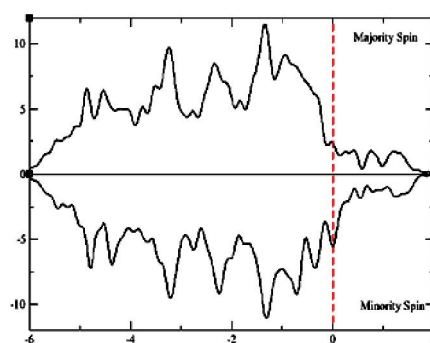


شکل ۷. طول پیوند Cu(1)-O(4) (آنگستروم).

شکل ۸ ثابت‌های شبکه بهینه شده را نشان می‌دهد. همان‌طور که واضح است با افزایش میزان ناخالصی K پارامتر شبکه b کوچکتر شده و پارامتر شبکه a بزرگتر



شکل ۵. چگالی حالات جزئی اتم O(1) در غلظت‌های x=۰٫۰۱۶۲۵ و ۰٫۰۵.



شکل ۶. چگالی حالات کل (بالا) و چگالی حالات جزئی اتم مس (پایین) در حالت x=۰٫۵.

شکل ۶ چگالی جزئی الکترونی اسپین بالا و پایین مربوط به اتم مسی که در صفحه CuO₂ و نزدیک به اتم پتاسیم قرار گرفته را در حالت x=۰٫۵ نشان می‌دهد. در این مورد سیستم دارای مغناطش ۰٫۶۶ μB است. بررسی چگالی جزئی اتم پتاسیم و مس نشان می‌دهد که مغناطش موجود به دلیل برهمکنش اتم‌های مس و

اتم‌های مس در نظر گرفته شده است، که این مقدار گاف سیستم پادفرومغناطس $YBa_2Cu_3O_6$ (که از نوع "عایق مات" می‌باشد) را به خوبی در هماهنگی با نتایج محاسباتی و آزمایشگاهی نشان می‌دهد [۲۹].

بررسی پارامترهای شبکه نشان دهنده عدم تغییر آنها بعد از استفاده از تقریب $GGA+U$ است ولی بررسی مکان اتم‌ها در سلول واحد، زوایای میان آن‌ها و طول پیوندها نشان دهنده تغییرات جزئی آن‌ها است (جدول ۴).

با استفاده از این تقریب مغناطس سیستم در حالت $X=0.5$ برابر $1.4 \mu_B$ به دست آمده است که تقریباً 2.12 درصد از مقدار قبلی آن بیشتر است.

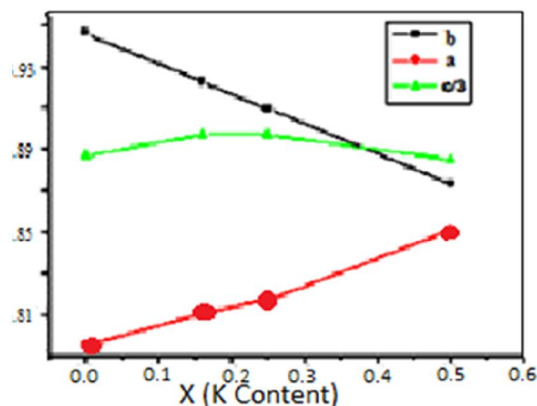
جدول ۴. طول پیوندها (آنگستروم) در حالت $X=0.5$ با استفاده از تقریب‌های GGA و $GGA+U$.

	Cu(1)-O(4)	Cu(1)-Cu(2)	Cu(1)-O(1)
GGA	۱.۸۳	۳.۵۳	۱.۹۵
GGA+U	۱.۹	۳.۶۸	۱.۹۵

نتیجه گیری

در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، با روش امواج تخت و استفاده از شبه پتانسیل، به بررسی اثرات جای‌گذاری پتاسیم در ترکیب $YBa_{2-x}K_xCu_3O_7$ با مقادیر $x=0.16$ ، 0.25 ، 0.5 و 0.75 پرداخته شده است. بررسی چگالی حالت‌های جزئی نشان می‌دهد که اتم‌های $O(1,4)$ در نزدیکی سطح فرمی دارای مؤلفه‌های بزرگی هستند که نقش مهمی در دمای گذار ابررسانایی دارند. با افزایش میزان پتاسیم تغییراتی در چگالی حالت‌های جزئی این اتم‌ها به وجود آمده است که نشان دهنده کاهش دمای گذار ابررسانایی با افزایش میزان پتاسیم است. از طرفی با توجه به اینکه نتایج محاسبات با رفتار تجربی و پارامترهای بلوری نمونه‌ها قابل مقایسه است می‌توان نتیجه گرفت که محاسبات

شده و در کل تغییرات در پارامتر شبکه c ناچیز بوده است، که می‌توان نتیجه گرفت با افزایش میزان پتاسیم گذار فاز ساختاری تتراگونال به اورتورمبیک با سرعت کمتری صورت گرفته و بنابراین دمای گذار ابررسانایی کاهش یافته است [۸].



شکل ۸. تغییر ثابت‌های شبکه a, b, c برحسب آلیاژی پتاسیم (نقاط بیانگر مقادیر محاسبه شده‌اند و خطوط برای راهنمایی رسم شده‌اند).

با توجه به اینکه نظریه تابعی چگالی برای بررسی سیستم‌های همبسته قوی مانند ابررساناهای دمای بالا خیلی مناسب به نظر نمی‌رسد لذا محاسبات را تحت تصحیحات پارامتر هابارد (U) دوباره پی‌گیری می‌کنیم. برای ترکیبات ۱۲۳ تاکنون محاسبات زیادی در قالب تقریب $LDA+U$ انجام شده هر چند گزارشات نشان می‌دهند که پارامترهای تعادلی بلور، فرکانس فونونی و سطوح فرمی تأثیر جزئی از اعمال پارامتر هابارد در محاسبات می‌یابند [۲۸] ولی حضور برخی از انواع ناخالصی‌ها (از جمله فلزات واسطه) در سیستم می‌تواند باعث مهم شدن اثرات تبدیلی-همبستگی شده و استفاده از پارامتر هابارد در محاسبات برای تصحیح نتایج ضروری گردد. بنابراین در این قسمت نتایج محاسبات را با وارد کردن پارامتر هابارد و با استفاده از شبه پتانسیل‌های قبلی گزارش می‌کنیم.

لازم به ذکر است که پارامتر موثر U با استفاده از گزارش دیگران به میزان ۹ الکترون ولت برای اوربیتال‌های d

[10] I. Kontoulis, X. Turrillas, R. Meiselst, S. Bungrea, B.C.H. Steele, Increase of the 0 - T transition temperature by Potassium doped of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, *Journal of the Less-Common Metals* 150 (1989)139 – 145.

[11] A.Veneva, I. Iordanov, L. Toshev, A. Stoyanova-Ivanova, D.Gogova, A study of the effect of KClO_3 addition on the AC susceptibility and microstructure of high-temperature (T_c^{onset} at 105 K), YBCO ceramic superconductors, *Physica C* 308 (1998) 175–184.

[12] A. Veneva, N. Sakai, K. Ogasawara, S. Seo, M. Murakami, Effect of KClO_3 addition on the physical properties of YBCO HTSC, *Physica B* 284-288 (2000) 1029-1030.

[13] S. Celebi, A. Ozturk, I. Karaca, U. Kolemen, The effect of potassium doping on resistive transitions and transport critical current of bulk YBCO high- T_c superconductors, *Turkish Journal of Physics* 24 (2000) 567-576.

[14] R. Fehrenbacher, T.M. Rice, Unusual electronic structure of $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, *Physical Review Letters* 70 (1993) 3471-3474.

[15] R. Kouba, C. Ambrosch-Draxl, Investigation of Alg phonons in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ by means of linearized-augmented-plane-wave atomic-force calculations, *Physical Review B* 56 (1997) 14766-14770.

[16] S. Massidda, YU. Jaejun, A.J. Freeman, Electronic structure and properties of YBCO, A low dimensional, low density of states superconductor, *Physics latter A* 122 (1987) 197-202.

[17] K. Larbaoui, A. Tadjer, B. Abbar, H. Aourag, B. Khelifa, C. Mathieu, State of the art simulations in electronic structure and total energy for the high temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, *Journal of Alloys and Compounds* 403 (2005) 1–14.

[18] H. Masahiko, U. Tsuyoshi, M. Yoshimasa, Electronic structure of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ by density-functional pseudopotential band calculation, *Physica C* 185—189 (1991) 1551-1552

[19] H.J. Monkhorst, D.J. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B* 13 (1976) 5188-5192.

ابتدا به ساکن یک ابزار مناسب برای بررسی نمونه‌های ۱۲۳ آلیبده شده با عناصر غیرفلز واسطه‌ای می‌باشد.

مراجع

[1] B. Khoshnevisan, D.K. Ross, D.P. Broom, M. Babaeipour, Observations of twinning in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, $0 < x < 1$, at high temperatures, *Journal of Physics: Condensed Matter* 14 (2002) 1–16.

[2] I. Felner, B. Barbara, Vacuum annealing treatment effects on structure and superconductivity in $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ and $\text{YBa}_{2-x}\text{K}_x\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, *Solid State Communic* 66 (1988) 205-210.

[3] X.S. Wu, F.Z. Wang, S. Nie, L. Yang, S.S. Jiang, Structure and superconductivity in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ with additives of NaNO_3 and NaCl , *Physica C* 339 (2000) 129-136.

[4] J.Y. Khan, High-temperature superconductivity ($T_c^{\text{onset}} \approx 135\text{K}$) in $\text{K}_{0.2}\text{Ba}_{0.5}\text{Y}_{0.3}\text{CuO}_{7-z}$, *Mater, Science Letters* 7 (1988) 53-55.

[5] T. Beals, J.S. Thorp, A.S. Al-Hawery, J. Mater, A 124 K transition in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ measured by an inductance-probe method, *Science Letters* 11 (1992) 192-193.

[6] P.S. Mukherjee, A. Simon, M.S. Sarma, A. Damodaran, Oriented grain growth in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ by alkali metals (Li, Na & K) substitution, *Solid State Communic* 81 (1992) 253-256.

[7] K.H. Yoon, S.S. Chang, Characteristics of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ high- T_c superconductor with KCl , *Journal of Applied Physics* 67 (1990) 2516-2519.

[8] A. Veneva, N. Sakai, K. Waki, M. Murakami, The Effect of KClO_3 Addition on the Superconducting Properties and Microstructure of YBCO HTSC Materials, *Advanced Superconductor* 11 (1999) 689.

[9] M. Farbod, M. Zargar Shoushtari, Potassium substitution effects in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ superconductor, *Iranian Journal of Physics Research* 6 (2006) 199-201.

- [20] B. Khoshnevisan, M. Farbod, Study of Potassium content and its role in doped superconductor $\text{YBa}_{2-x}\text{K}_x\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ with Rietveld analysis of XRD patterns, *Iranian Journal Of Crystallography and Mineralogy* 17 (2009) 103-108.
- [21] K. Larbaoui, A. Tadjera, B. Abbara, H. Aouragb, B. Khelifac, C. Mathieu, Effect of oxygen deficiencies and the substitution of fluorine on the electronic states in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ superconductors, *Journal of Alloys and Compounds* 414 (2006) 20-25.
- [22] B. Khelifa, A. Tadjer, H. Aourag, B. Abbar, K. Larbaoui, C. Mathieu, State of the art simulations in electronic structure and total energy for the high temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, *Journal of Alloys and Compounds* 403 (2005) 1-14.
- [23] U. Schwingenschlogl, C. Schuster, First-principles calculations of electronic states and self-doping effects at a 45° grain boundary in the high temperature $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ superconductor, *Physical Review Letters* 102 (2009) 227002.
- [24] H. Eschrig, K. Koepernik, I. Chaplygin, Density functional application to strongly correlated electron systems, *Journal of Solid State Chemistry* 176 (2003) 482-495.