

## تحلیل ساختاری نمایه‌های پراش از نمونه‌های دوقلویی در ابررسانای دمای بالا

بهرام خوشنویسان

گروه فیزیک دانشگاه کاشان

پست الکترونیکی: [b.khosh@kashanu.ac.ir](mailto:b.khosh@kashanu.ac.ir)

### چکیده

در اینجا یک رابطه تحلیلی برای توزیع شدت پراکنده‌ها در نمودارهای پراش از نمونه‌های دوقلویی ارائه می‌گردد. نشان داده می‌شود که در اثر تداخل از نواحی دوقلویی قله‌هایی در مکانهای مجازی پیکهای فاز تتراگونال ظاهر می‌گردد که به آنها قله‌های مرکزی گفته می‌شود و شدت آنها متناسب با ارتورومبوسیتی و پهناهای نواحی دوقلویی است. پژوهشگرانی که علاقه‌مند به مباحث انتقال فاز ساختاری که همراه با کاهش تقارن می‌باشند ممکن است بپذیرند که پهناهای نواحی دوقلویی را به عنوان یک پارامتر نظم در نظر بگیرند.

واژه‌های کلیدی: نقص دوقلویی، انتقال فاز، ابررسانای دمای بالا

### ۱. مقدمه

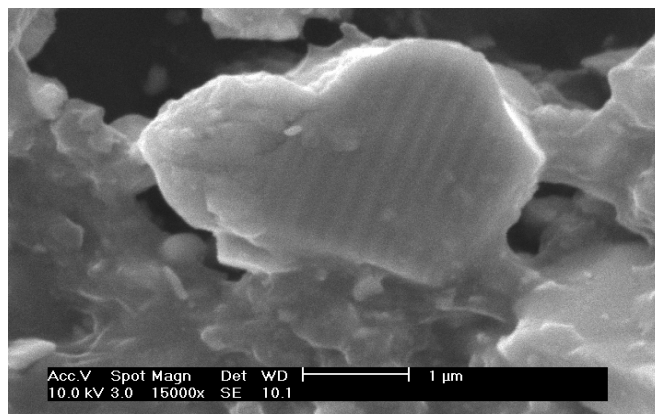
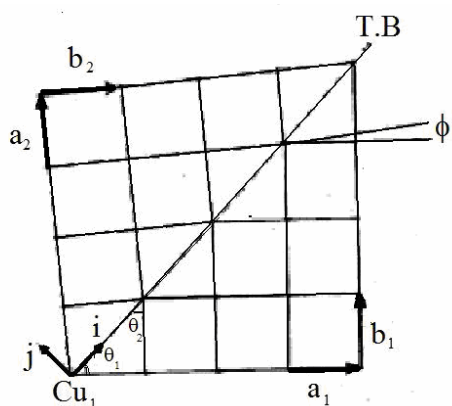
پدیده دوقلویی در YBCO هنگامی رخ می‌دهد که اکسیژن در صفحات پایه‌ای آن جذب می‌گردد و در این صورت میدان کرنشی ایجاد شده باعث انتقال ساختاری مرتبه دوم از فاز پاراالاستیک تتراگونال (P4/mmm) به فاز فروالاستیک ارتورومبیک (Pmmm) می‌گردد. در مقالات قبلی [۱ و ۲] شواهد تجربی این انتقال مرتبه دوم با استفاده از داده‌های پراکنده نوترون ارائه گردیده است و همچنین با محاسبات عددی مستقیم نشان داده شد که اگر اختلاف فاز میان پرتوهای پراکنده شده از دو ناحیه دوقلویی مجاور به صورت:

$$\Phi \approx 2p(h+k)TS$$
 باشد (که:  $S = \frac{2(b-a)}{b+a}$  و  $T$  متوسط پهناهای ناحیه دوقلویی در صفحات پایه‌ای و در راستای  $\langle 110 \rangle$  می‌باشد) آنگاه تداخل آنها سازنده بوده و منجر به ایجاد یک قله مرکزی (c.p) در میان قله‌های براگ ( $hk^0$ ) و ( $kh^0$ ) مربوط به فاز ارتورومبیک می‌شود. این c.p اگرچه که یک قله اصلی براگ

نیست اما چون در مکان متوسط دو قله اصلی ارتورومبیک می‌باشد می‌تواند با قله معادل فاز تتراگونال در نمایه‌های پراش کاملاً اشتباه گرفته شود و در نتیجه انتقال فاز Tet/Orth از نوع مرتبه اول (با حضور فاز مخلوط) قلمداد گردد. اگرچه اخیراً در زمینه آثار تداخلی میان نواحی کریستالی دوقلویی در نمایه‌های پراش مقالاتی منتشر شده است [۳ و ۴] اما در اینجا سعی می‌شود با یک رهیافت تحلیلی به اهمیت این آثار تداخلی پردازیم و به معرفی یک رابطه ریاضی در این مورد خواهیم پرداخت.

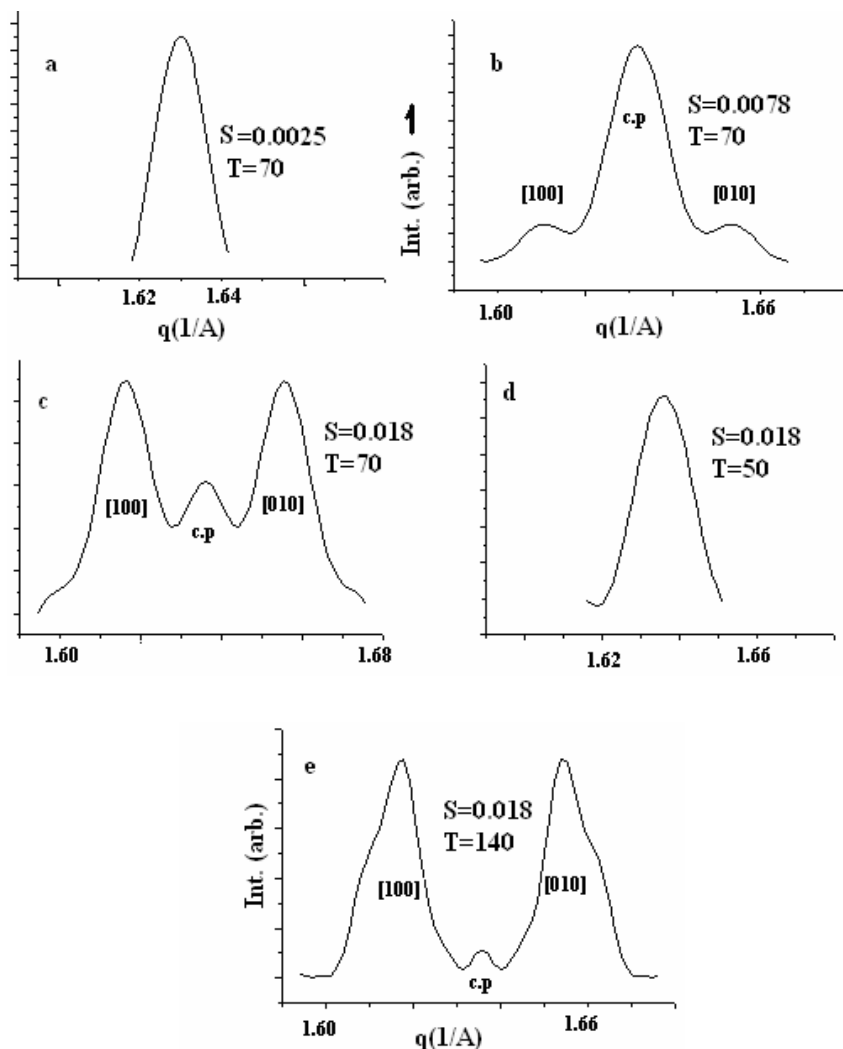
### ۲. مدل ریاضی

نواحی دوقلویی از دیدگاه بلورشناسی نواحی دوگانه‌ایی هستند که در مجاورت یکدیگر و با جابه‌جایی میان ثوابت شبکه‌ایی  $a$  و  $b$  میان آنها (در صفحات پایه‌ایی) هرکدام به دیگری تبدیل می‌گردد. بنابراین صفحات مرزی میان آنها (مرز

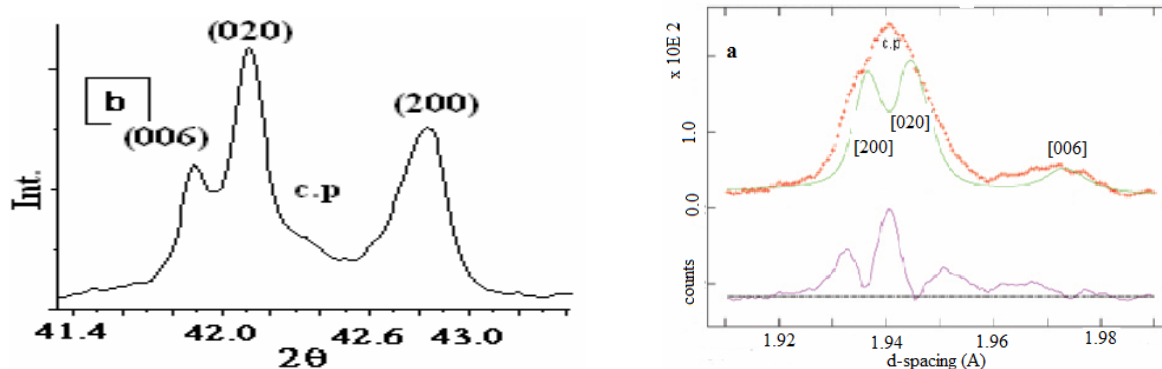


شکل ۲. مدل بیانگر نواحی دوقلوبی مجاور در صفحات پایه‌ایی YBCO. راستای T.B به موازات محور xها است. زاویه عدم تطابق عبارت است از  $\phi = \tan^{-1} b/a - \tan^{-1} a/b$ .

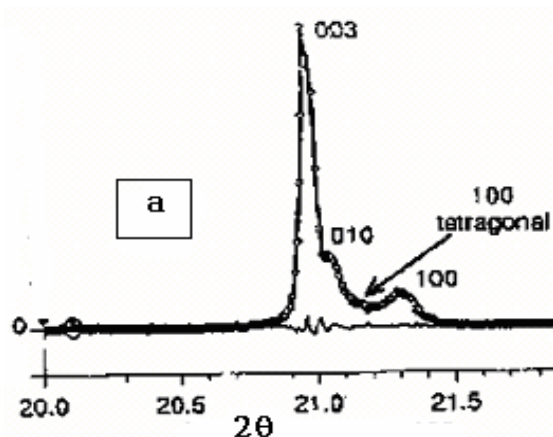
شکل ۱. تصویر SEM از یک دانه در نمونه پودری YBCO بعد از بازپخت که حاوی نواحی دوقلوبی راه راه می‌باشد.



شکل ۳. مدل محاسباتی از مجموعه قله‌های {۱۰۰} برحسب مقادیر متفاوت S و T. دیده می‌شود با افزایش S و T قله‌های اصلی براگ برخلاف c.p رشد می‌کنند.



شکل ۴. نمایه پراش سینکروترون از مجموعه قله‌های  $\{h00\}$ ، a- درست پس از انتقال فاز، b- مراحل تکمیلی انتقال فاز.



شکل ۵. پالایش ریتولد با مدل فاز مخلوط توسط دیگران [۸].

$$S(\mathbf{q}) = \left| \sum_r \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \right|^2 \quad (1)$$

که برای نواحی دو قلویی ۱،۲ داریم  $\mathbf{q}$  بردار موجی پراکنده گی و  $\mathbf{R}$  بردار براوه است):

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_1 \approx 2\pi f (h+k)S = Y_1 \quad (2)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_2 \approx 2\pi f' (h+k)S = Y_2 \quad (3)$$

که  $f' = 1 - f$  ( $0 < f' < 1$ ) و ترتیب در نواحی دوقلویی ۱ و ۲ تعریف می‌شوند. حال اگر  $N$  بیانگر تعداد کل سلولهای واحد در نواحی دوقلویی باشد داریم [۶]:

$$S(\mathbf{q}) = \left| N^2 \left\{ \left[ \frac{1 - \cos \gamma_1 - \cos T\gamma_1 + \cos(T-1)\gamma_1}{2(1 - \cos \gamma_1)} + \frac{1 - \cos \gamma_2 - \cos T\gamma_2 + \cos(T-1)\gamma_2}{2(1 - \cos \gamma_2)} \right]^2 + \left[ \frac{\sin \gamma_1 - \sin T\gamma_1 - \sin(1-T)\gamma_1}{2(1 - \cos \gamma_1)} + \frac{\sin \gamma_2 - \sin T\gamma_2 - \sin(1-T)\gamma_2}{2(1 - \cos \gamma_2)} \right]^2 \right\} \right|$$

دوقلویی (T.B) مانند صفحات با تقارن آئینه‌ای عمل می‌کنند و در راستاهای  $\langle 110 \rangle$  و  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  عمود بر صفحات پایه‌ایی قرار می‌گیرند.

شکل ۱، این نواحی را به صورت یک الگوی راه راه با پهنای متوسط یکسان در تصویر SEM از یک دانه در نمونه پودری YBCO بعد از بازپخت نشان می‌دهد. در دماهای بالا هنگام بازپخت با توجه به نقش آنتروپی این انتظار می‌رود که پهنای آنها حول یک مقدار متوسط افت و خیز نماید [۵].

در این مدل پهنای متوسط این نواحی را با  $T$  نشان می‌دهیم و لذا اگر راستای T.B را موازی با محور xها اختیار کنیم در این صورت  $T$  در راستای محور yها خواهد بود (شکل ۲).

جزئیات محاسبات [۶] نشان می‌دهد که شدت نمایه پراش از دو ناحیه مجاور در قلویی عبارت است از:

(۴)

و سرانجام  $f^1 = 1 - f$  ( $0 < f < 1$ ) که  $f^1$  و  $f$  به ترتیب در نواحی دو قلوبی ۱ و ۲ تعریف می‌شوند.

کاهش یافته به طوری که نهایتاً پراکنده‌گی از دو ناحیه به صورت مستقل صورت می‌پذیرد. بر این مبنا می‌توان نتیجه گرفت:

الف) درست پس از انتقال Tet/Orth به دلیل کوچک بودن مقادیر  $T$  و  $S$  در آغاز تشکیل نواحی دوقلوبی جداشدگی میان قله‌های [۱۰۰] و [۰۱۰] به کندی صورت می‌پذیرد و به این دلیل نتایج ناشی از پالایش ریتولد در این حالت چندان رضایت بخش نمی‌باشد (شکل ۴) [۷].

ب) به دلیل حضور قله‌های مرکزی (c.p) در مکان قله‌های فاز مجازی تراگونال در نمایه پراش (شکل ۵a) پالایش ریتولد در صورتی که فاز مجازی تراگونال را مصنوعاً در مدل برآزش وارد کنیم منجر به نتایج بهتری می‌گردد اما این امر به هیچ وجه بیانگر حضور فاز مخلوط تراگونال و ارتورمبیک و در نتیجه انتقال فاز مرتبه اول Tet/Orth نمی‌باشد. در حقیقت این کار قبلاً توسط دیگران و با توجیهی قابل بحث انجام شده است (شکل ۵b) [۸].

### ۳. نتایج و بحث

با ترسیم رابطه فوق (شکل ۳) برای مجموعه قله‌های {۱۰۰} در فاز ارتورمبیک بر حسب پارامترهای  $S$  و  $T$  دیده می‌شود در مقادیر کوچک آنها مرکزی بصورت غالب بوده و قله‌های اصلی را می‌پوشاند اما با افزایش مقادیر آنها قله‌های اصلی [۱۰۰] و [۰۱۰] از جوانب بتدریج رشد کرده و سرانجام قله‌های اصلی باقی‌مانده c.p حذف می‌گردد (بیشینه مقدار تجربی  $S$  عبارت است از: ۰/۰۱۸).

شکل ۳ به خوبی نشان می‌دهد که در رابطه ۴ هرچه مقدار  $T$  افزایش یابد نقش سهم تداخل میان نواحی دوقلوبی مجاور

### مراجع

1. B Khoshnevisan, D K Ross, D P Broom, M Babaeipour, *J. Phys.: Cond. Mat.* **14**(2002)9763 .
2. B Khoshnevisan, D K Ross, *4th international conference on Magnetic and Superconducting Materials (MSM'05)*, Agadir Morocco (2005).
3. S A Hayward, E K H Salje, *Z Kristallogr.* **220** (2005) 994.
4. H boysen, *J. Phys.: Cond Mat.* **19**(2007)275206.
5. A G Khachaturyan, "Theory of Structural Transformation in Solids" Chap.11, New York Wiley (1983).
6. B Khoshnevisan; *Physica C* **468** (2008) 2187.
7. W I F David, O Moze, F Licci, F Bolzoni, R Cywinski and S Kilcoyne, *Physica B* **156** (1989) 880.
8. M Rand, J I Langford and J S Abell, *Phil. Mag. B* **68** (1993) 17.