University of Mosul
College of Science

The influence of Ca content on the superconducting properties of $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ compound

Abbas Hussien Rostam Ahmed

Ph.D Thesis

Solid State Physics

Supervised By

Professor

Dr. Bassam Mahmud Mustafa

2014 A.D. **1436 A.H.**

Abstract

The goal of the research is to study the effect of Ca concentration on the superconductivity compound $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. The study can be divided into three parts.

The first part include the concentrated a model to explain the structural changes in the crystal of YBCO due to the addition of Ca to the YBCO compound, this is done by calculating the above effect on the potential energy of the crystal of the compound $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ and its relation to the electrostatic potential energy, critical temperature (T_c), lattice parameters (a_{pa}), volume lattice parameter (V_{pa}), orthorhombicity, and the hole concentration. This is investigated by applying the ionic model to calculate the change in the electrostatic potential energy (EP) due to increasing the Ca content in the compound in $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. It is found that Ca^{2+}substitution for Y^{3+} leads to decrease EP caused by increased ion volume and decrease of charge, this explains changes of superconducting structure parameters such as: lattice parameter (a_{pa}),volume lattice parameter (V_{pa}), orthorhombicity. As a result (T_c) decreases with increasing Ca content due to decrease of EP which leads to change of the crystal structure and thus decreasing oxygen content and as a result decreasing of (T_c). Finally considering all above effects the decrease of EP will increase the superconducting current.

The second parts of this work concentrated on studying the effect of increasing the superconducting current due to the increase of Ca content. This is done by investigating the charge transfer mechanism of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ compound, for compositions $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (x = 0, 0.05, 0.1, 0.2) .Substitution of Ca changes the charge content as a result of potential energy changes which lead to structural changes (positions of ions and distances between them). As a result, variations in Cu(2)-O(3) and Cu(2)-O(2) bond lengths and the effective coordination of Cu(2) with respect to oxygen ions occurs. Starting from zero Ca content the positions and distances of all ions in the crystal were calculated for all Ca contents, then calculation of the charge transfer mechanism from CuOx chains to CuO_2 planes and thus effective hole doping dependences P(x) on bond valance sum, hole concentration, energy gap and current density, in $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (x=0.1 and x=0.2) have been calculated assuming that the net hole concentration, result from substitution of Y^{3+} by Ca^{2+}, by

applying the concept of bond valance sum model for calculation the hole concentration in the CuO_2 plane. The model proposed assumes that the oxygen valance sum and Cu(2) valance sum influence the hole concentration p(x) in the plane and as a result on the hole conduction in the crystal. These p(x) dependences are combined with universal (parabolic) phase relation Tc(p) . Putting all the above concept the study concluded that Ca affect on current density may be calculated according to one of the following equations:

$$J = 2.22e * \sqrt{\frac{E_g}{m}}\langle 0.16 + 0.11\sqrt{1 - \frac{T_c}{T_{c\,max}}}\rangle, \quad J = 2.22 * e\sqrt{\frac{E_g}{m}}\langle 0.16 + \frac{n_{Ca}}{2} - (7 - \delta)\rangle$$

Here T_c and E_g calculated a function of Ca content. From the above equation current density depend on the binding energy of the cooper pairs which are the charge carries in the superconductor.

The part three of the work is sophisticated one using the quantum well concept (the nano concepts) to understand the effect of calcium content on the binding energy, Cooper pairing on which is considered as one of the most important problem that the research concentrated around it in high temperature superconducting. Also the relation between binding energy with all of (energy gap, hole concentration, tunneling probability and current density) for the high temperature superconductor $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ compound where (x=0 to x=0.2) are studied. This is done by following the model of (Tavkhelidze, 2010) which considers that formation of Cooper pairs happens during tunneling mechanism of holes between the two of CuO_2 layers in the YCBCO crystal which are considered as forming adjacent potential wells. In this work the researcher modified the model to study the effect the Ca content by considering the change in the distance between the CuO_2 layers as a function of Ca content such that the binding energy

$$E_{bin} = \frac{4\sqrt{2}\; m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3\rho} \times \int_{U-\emptyset}^{0} (U - \emptyset - E)\; exp\left[-\frac{2(d(n_{Ca}) - R_c)}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right]\sqrt{E}\,dE$$

$\emptyset$ is a work function, $\hbar$ is the Plank's constant, m is the electron mass, and U is the height of the potential barrier, E is the energy, R_c is the electron cloud radius in tunneling direction and d is the distance between the two CuO2 planes $U - \emptyset$=0.3 eV, $\emptyset = 4eV$.

جامعة الموصل
كليــة العلوم

تأثير محتوى الكالسيوم على خواص المركب الفائق التوصل

$$Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$$

عباس حسين روستم احمد

أطروحـة دكتوراه

علوم الفيزياء/ فيزياء الحالة الصلبة

بإشراف
الأستاذ الدكتور
بسام محمود مصطفى الامام

1435 هـ
2014 م

الخلاصة

هدف هذا العمل هو دراسة تأثير محتوى الكالسيوم في المركب الفائق التوصل على التوصيلية الفائقة له والدراسة قسمت الى ثلاثة اجزاء. $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

ركز الجزء الاول على بناء النموذج لتفسير التغيرات التركيبية في البلورة YBCO بسبب اضافة Ca الى المركب اعلاه وتم ذلك من خلال حساب تغير الطاقة الكامنة بفعل تغير محتوى الكالسيوم ومن ثم علاقتها لكل من الطاقة الكهروستاتيكية الكامنة، ودرجة الحرارة الحرجة (T_C)، والمعالم الشبيكي (a_{pa})، وكذلك معلم الثابت الحجمي (V_{pa}) وكذلك معلم الصفة الشكلية المتوازي السطوح وكذلك التركيز الثقوب.

وقد تم من خلال تضيف النموذج الايوني لحساب التغير في الجهد الكهروستاتيكي والناتج عن تغير تركيز Ca في المركب $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ولقد وجد ان التعويض عن Y^{3+} ب Ca^{2+} يقود الى تناقص الجهد الكهروستاتيكي EP سبب زيادة الجهد الايوني ونقصان الشحنة وهذا يفسر التغير كل من المعالم (الثابت الشبيكي)، كالمعلم الشبيكي الحجمي (V_{pa}) وكذلك الصفة الشكلية المتوازي السطوح. وبالنتيجة تقل قيمة (T_C) بزيادة تركيز Ca نتيجة نقصان الجهد الكهروستاتيكي EP وهذا يؤدي الى التغيرات في التركيب البلوري وكذالك نقصان محتوى الاوكسجين وهذا التأثير يقلل قيمة (T_C). وهذا التغيرات تؤدي الى زيادة التيار الفائق التوصيل وكما تم ذلك في الجزء الثاني.

ان الجزء الثاني في العمل يركز على دراسة زيادة التيار الفائق التوصيل مع زيادة تركيز Ca، وتم ذلك من خلال استقصاء اليه انتقال الشحنة في المركب $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ وللتراكيب $(x = 0, 0.05, 0.1, 0.2)$. ان التعويض Ca يغير محتوى الشحنة وبالتالي وهذا يؤدي الى تغير الطاقة الكامنة ويؤدى الى التغيرات تركيبية (مواقع الايونات والمسافات بينها) حيث يؤدي ذلك الى التغيرات في اطوال الاواصر (Cu2-O3 and Cu2-O2) والمواقع المؤثره ل Cu2 بالنسبة لايونات الاوكسجين.

مبتدئين بالتركيز صفر ل Ca قمنا بالحساب المواقع والمسافات لكل الايونات في البلورة ثم بعد ذلك تم الحساب مع تغير تركيز Ca. ومن ثم تمت دراسة الية انتقال الشحنات بين المستوين (من CuO_x الى CuO2) وبالتالي حساب اعتماد التطعيم المؤثر للثقوب p(x) على مجموع الاصرة التكأفو (BVS) كذلك على التراكيز الثقوب، الفجوة الطاقة وكذلك الكثافة التيار في ($Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) والتركيز (x=0.2 ,x=0.1) ولقد تم حساب ذلك بافتراض ان محصلة تركيز الثقوب الناتج عن ابدال Y^{3+} ب Ca^{2+} من خلال تطبيق مفهوم (نموذج مجموع الاصرة التكأفو) للحساب التركيز الثقوب في المستوى CuO2. ونموذج المقترح يفترض ان مجموع التكأفو أوكسجين التكأفو Cu2 يؤثر على التراكيز الثقوب p(x) في المستوى وبالنتيجة على التراكيز في البلورة. ان هذا اعتماد ل p(x) قد ربط بسلوك منحني قطع مكافيء العام عند رسم علاقة طورية بين ($T_C(P)$) والتي تسمى ب السنامز

ويوضع كل المفاهيم السابقة في حسابنا توصلنا الى ان تأثير Ca في الكثافة التيار يمكن ان يحسب وفقا للمعادلات التالية:

$$J = 2.22e * \sqrt{\frac{E_g}{m}}\langle 0.16 + 0.11\sqrt{1 - \frac{T_c}{T_{c\,max}}}\rangle, \quad J = 2.22 * e\sqrt{\frac{E_g}{m}}\langle 0.16 + \frac{n_{Ca}}{2} - (7 - \delta)\rangle$$

حيث T_c ، E_g هي دوال لتركير الكالسيوم. وفي المعادلة السابقة تصل الى أن كثافة التيار تعتمد على الطاقة الربط لازواج كوبر والتي تغبر هي حاملات الشحنات في الموصل الفائق.

أن الجزء الثالث في هذا العمل هو الجزء الاكثر عميقا حيث اعتمدنا مفهوم الحيطان الكمية (quantum) well concept (باستخدام المفاهيم النانوية) لكن لتفهم تأثير محتوى الكالسيوم على الطاقة الربط وعلى عملية تكوين ازواج كوبر ، والتي تعتبر من اهم مسائل التي يجري عنها البحث في موضوع التوصيلية الفائق، وكذلك علاقة مع كل من (فجوة الطاقة، تركيز الثقوب، احتمالية الانتفاق وكذلك كثافة التيار) للمركب الفائق التوصل ذي درجة الحرارة العالية $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ حيث (x=0 to x=0.2). وتم ذلك باتباع نموذج العالم الجورجي تفاكهالديز (Tavkhelidze, 2010) والذي اعتبر ان تكوين ازواج كوبر يتم خلال عملية انتفاق الثقوب بين طبقتين CuO2 في بلورة المركب YBCO والتي تشكلان بئري جهد متجاوران.

وفي عملنا هذا تم تطوير هذا النموذج لدراسة تأثير محتوى الكالسيوم مستندين الى ثغير المسافات بين الطبقات CuO2 كدالة محتوى الكالسيوم وكذلك تكوين طاقة الربط كما يلي:

$$E_{bin} = \frac{4\sqrt{2}\ m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3\rho} \times \int_{U-\emptyset}^{0} (U - \emptyset - E)\ exp\left[-\frac{2(d(n_{Ca}) - R_c)}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right]\sqrt{E}dE$$

$\emptyset$ هي دالة الشغل $\hbar$ ثابت بلانك m هي كتلة الالكترون U هو ارتفاع حاجز الجهد E هي طاقة الالكترونات R_c هو نصف قطر السحابة الالكترونية باتجاه الانتفاق d هي المسافة بين مستوين CuO2، $\emptyset = 4eV$ ، $U - \emptyset$=0.3 eV.