

СТРУКТУРА ГРАНИЦ МЕЖДУ ДВОЙНИКАМИ И ДВОЙНИКОВЫМИ КОМПЛЕКСАМИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

*Ю.А.Осипьян, Н.С.Афоникова, Т.К.Парсамян,
В.Ш.Шехтман, И.М.Шмытько*

Рентгенографически установлено, что границы между двойниками и полидвойниковыми комплексами в кристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ не являются моноатомными плоскостями, а представляют собой переходные области, вдоль которых непрерывным образом параметр a переходит в параметр b , проходя через состояние тетрагональной фазы ($a = b$). Общий объем, занимаемый этими областями, составляет $\sim 6\%$ кристалла.

Ранее мы сообщали о наличии в двойниковых кристаллах 1–2–3 развитой системы границ между структурными доменами (двойниками)¹. Настоящая работа посвящена детальному изучению структуры этих границ, поскольку известно влияние двойниковой структуры на сверхпроводящие характеристики². При постановке экспериментальной задачи учитывалось, что границы в некоторых двойниковых кристаллах, имеющих аналогичный ВТСП фазовый переход тетрагон-орторомб, не являются моноатомными плоскостями, а представляют собой переходные области толщиной в несколько микрон, вдоль которых угол ромбичности непрерывным образом меняется из одной двойниковой ориентации в другую, проходя через состояние тетрагональной фазы^{3, 4}.

Исследовался кристалл, выросший в процессе медленного охлаждения расплавленной смеси оксидов Y_2O_3 , BaO и CuO . Кристалл имел форму прямоугольной пластины черного цвета с зеркальными гранями размером $0,5 \times 1,0 \times 0,03$ мм³. Параметры решетки, измеренные рентгенографически, составляли $a = 3,86$ Å, $b = 3,92$ Å, $c = 11,59$ Å.

Метод исследования основывался на использовании стандартной рентген-дифрактометрической схемы в геометрии на прохождение. Особенностью являлось использование точечного (5 мкм) источника излучения в отличие от традиционного протяженного. В этом случае наряду с обычными рентген-дифрактометрическими исследованиями можно проводить запись топограмм углового сканирования, помещая перед детектором излучения фотопластинку¹⁾.

Пример топограмм углового сканирования, полученных при отражении от плоскостей типа {100}, показан на рис. 1. Черные интенсивные пятна $A, B (A', B')$ – отражения от фрагментов кристалла, принадлежащих разным полидоменным комплексам. Каждому такому пятну $A (B)$ в отражении (200) (a – параметр) соответствует пятно $A' (B')$ в отражении (020) (b – параметр). На топограмме рис. 1б выделено отражение от отдельного полидвойникового комплекса. Вертикальная шкала на этих топограммах соответствует углам разориентации фрагментов. Углы между компонентами A и A' и B и B' отвечают углу двойникования.

Слабые размытые линии, соединяющие изображения двойниковых компонент, отображают переходные области при сопряжении двойников и двойниковых комплексов между собой. На топограмме можно выделить три типа соединительных линий. Линии AB' и BA' соответствуют непрерывному изменению межплоскостных расстояний из a в b фактически без изменения ориентации решетки. Линии AB и $A'B'$ соответствуют непрерывному изме-

¹⁾ В геометрии на прохождение фотопластинка должна быть неподвижной в отличие от геометрии Брегга, когда осуществляется $\theta - 2\theta$ сканирование.

нению угла разориентации двойниковой компоненты, имеющей определенное значение параметра решетки (a или b) Линии AA' и BB' отвечают непрерывному изменению параметра решетки из a в b при одновременном изменении угла разориентации отражающих плоскостей. Направление линий AA' и BB' совпадает с направлениями типа $\langle 110 \rangle$.

Следует особо остановиться на интерпретации "диффузных" линий типа $AA'(BB')$, $AB'(BA')$ и $AB(A'B')$ в виде переходных областей между двойниками и двойниковыми комплексами. Рассмотрим для примера линии типа $AA'(BB')$. Простейшим истолкованием такого дифракционного изображения могло бы служить предположение, что диффузные линии представляют фурье-образ набора тонких двойниковых прослоек, параллельных плоскостям $\{110\}$. Однако в этом случае изображение должно быть сим-

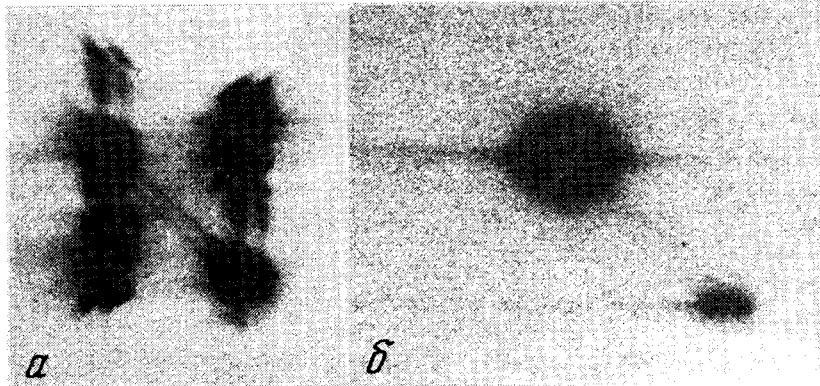


Рис. 1. Топограммы углового сканирования в геометрии Лаэ кристаллов 1–2–3, отражение $\{200\}$, a – кристалл, состоящий из нескольких полидвойниковых комплексов с взаимно перпендикулярными плоскостями двойникования; b – кристалл, состоящий из одного полидвойникового комплекса

метричным относительно изображений от макроскопических двойниковых участков $A(A')$ и $B(B')$. На топограммах (рис. 1 a , b) линии AA' и BB' фактически не выходят за пределы изображений макроучастков $A(A')$ и $B(B')$. Нет диффузных линий, аналогичных $AA'(BB')$ и на изображении кристалла в отражении (220) . Можно было бы также предположить, что диффузные линии обусловлены отражением от набора тонких прослоек, параллельных плоскостям $\{110\}$ и имеющих параметр $(a + b)/2$ тетрагональной фазы. Однако в этом случае следовало бы ожидать распределения интенсивности вдоль AA' с максимумом посередине между A и A' (B и B'). Однако измерение интегральных интенсивностей между отражениями (200) и (020) показывает, что параметру $d_{(200)} + d_{(020)}/2$ отвечает не максимальная интегральная интенсивность, а минимальная. Таким образом, остается предположить, что линии типа AA' и BB' отображают переходные области в кристалле, вдоль которых непрерывно меняется параметр решетки из a для одной двойниковой ориентации в параметр b для другой двойниковой ориентации, и одновременно изменяется ориентация отражающих плоскостей. Аналогичные рассуждения справедливы и для линий типа AB , $A'B'$, AB' и BA' .

Вышесказанное позволяет предложить схемы структур переходных областей между двойниками и двойниковыми комплексами. Такие схемы показаны на рис. 2. На рисунке выделены следующие ситуации: – когерентная двойниковая граница (рис. 2 a); – некогерентная граница между двойниковыми комплексами, имеющими взаимоперпендикулярные плоскости двойникования (рис. 2 b , c); – когерентная граница внутри отдельного двойника (рис. 2 d).

Верхние части схем 2б и 2в, зеркально отраженные относительно линии AA' , дают схемы некогерентных границ между полидоменными комплексами, имеющими одну плоскость, но противоположные направления двойникования. На рисунках выделены ориентации отражающих плоскостей при переходе через границу.

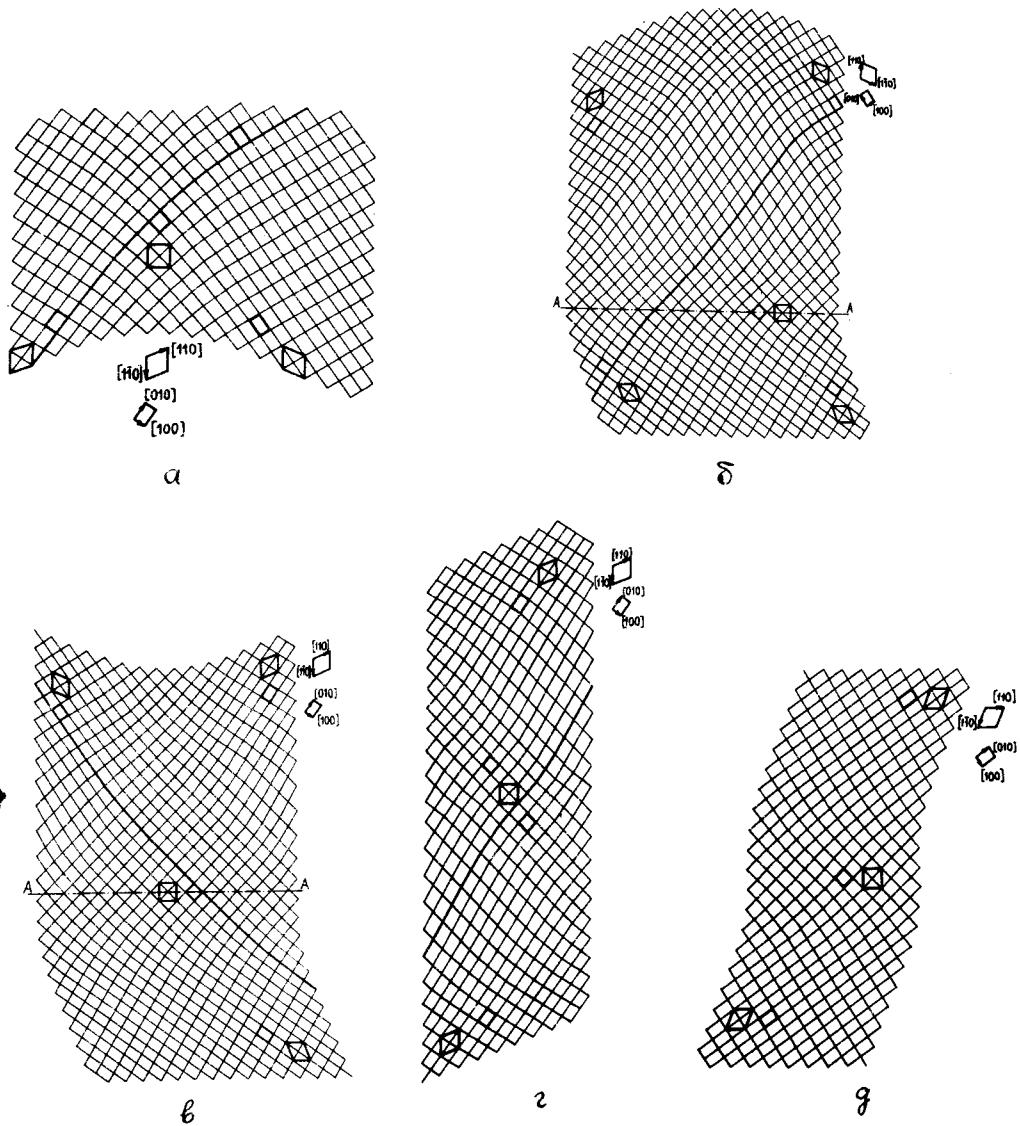


Рис. 2. Схемы границ сопряжения двойников и двойниковых комплексов

Для оценки размеров переходных областей между двойниками и двойниковыми комплексами были измерены интегральные интенсивности отражения для разных значений межплоскостных расстояний. Минимальная пиковая интенсивность для межплоскостных расстояний, лежащих между параметрами a и b ромбической ячейки и отвечающих переходным областям между двойниками, составляла величину $\sim 3\%$ от пиковой интенсивности двойниковых компонент. Учет полуширины отражений показывает, что переходные области в кристаллах занимают не менее 4 % всего кристалла. Оценка, основанная на учете увеличения интегральной интенсивности при приближении к двойниковым компонентам (a или b), дает величину $\sim 6\%$.

Полученные значения интегральной интенсивности позволяют оценить среднюю ширину переходных областей. Здесь следует отделить переходные области между двойниками и двойниковыми комплексами. Измерения интегральной интенсивности, проведенные для отдельного двойникового комплекса, показали, что "когерентные" двойниковые границы занимают объем меньше 0,5 % от объема двойниковых компонент. Таким образом, основная часть интегральной интенсивности, зарегистрированная для переходных областей, в исследуемом кристалле обусловлена границами между двойниковыми комплексами. Отсюда следует оценка толщины "некогерентной" двойниковой границы, получаемая из среднего размера двойниковых комплексов (~ 100 мкм) и среднего объема, занимаемого переходными областями ($\sim 4 \div 6$ %). Она составляет величину $\sim 2 \div 3$ мкм. Оценить размер когерентных двойниковых границ из полученных данных не представляется возможным.

Литература

1. Осипьян Ю.А., Афоникова Н.С., Емельченко Г.А. и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, **46**, 189.
2. Khlyustikov I.N., Budin A.I. Advances in Physics, 1987, **36**, 271.
3. Афоникова Н.С., Шехтман В.Ш., Шмытько И.М. ФТТ, 1985, **27**, 3201.
4. Афоникова Н.С., Боровиков В.В., Шмытько И.М. ФТТ, 1987, **29**, 813.

Институт физики твердого тела
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
2 марта 1988 г.