

CSTAM2012-D01-0035

## YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>薄膜中氧离子扩散行为的分子动力学模拟<sup>1)</sup>

刘崇, 张俊, 王连红, 舒勇华, 樊菁<sup>2)</sup>

(中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 氧离子的扩散作为YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>超导薄膜制备中的主要物质输运形式之一, 决定着薄膜晶体从非超导电的四方相向超导正交相的转变。本文以成型后的YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>薄膜为研究对象, 通过分子动力学模拟研究了不同晶位上氧离子的扩散特性, 重点探讨了温度等因素对氧离子扩散系数的影响。研究表明: 在温度低于 900 K时, 不同晶位上氧离子的扩散能力存在明显差异。Cu-O链上的氧离子具有较强的扩散能力, 而Ba-O层、Cu-O面内的氧离子的扩散能力依次降低, 致密的Cu-O面在一定程度上阻隔了氧离子沿 *c* 轴方向的长程迁移。然而随着温度升高, 氧离子扩散的晶位相关性逐渐减弱。此外, 氧离子在不同晶位上表现出独特的各向异性扩散行为, 随着温度升高氧离子扩散的各向异性变弱。模拟结果可为YBCO超导薄膜的生长机理研究及确定相关制备工艺提供参考。

**关键词:** 薄膜; 氧离子; 扩散; 分子动力学模拟

1) 国家自然科学基金(10921062)资助项目

2) Email: jfan@imech.ac.cn