

Indicios de orden añadido a la fase ortorrómbica del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ al otro lado de la zona Orto-II al atravesarla de manera isotérmica

Luccas, R. F.¹, Sobrero, C. E.^{1,2} y Malarría, J. A.^{1,2}

¹ Instituto de Física Rosario, CONICET - UNR, Bv. 27 de Febrero 210bis, S2000EZF Rosario, Argentina.

² Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, UNR, Av. Pellegrini 250, S2000BTY Rosario, Argentina.

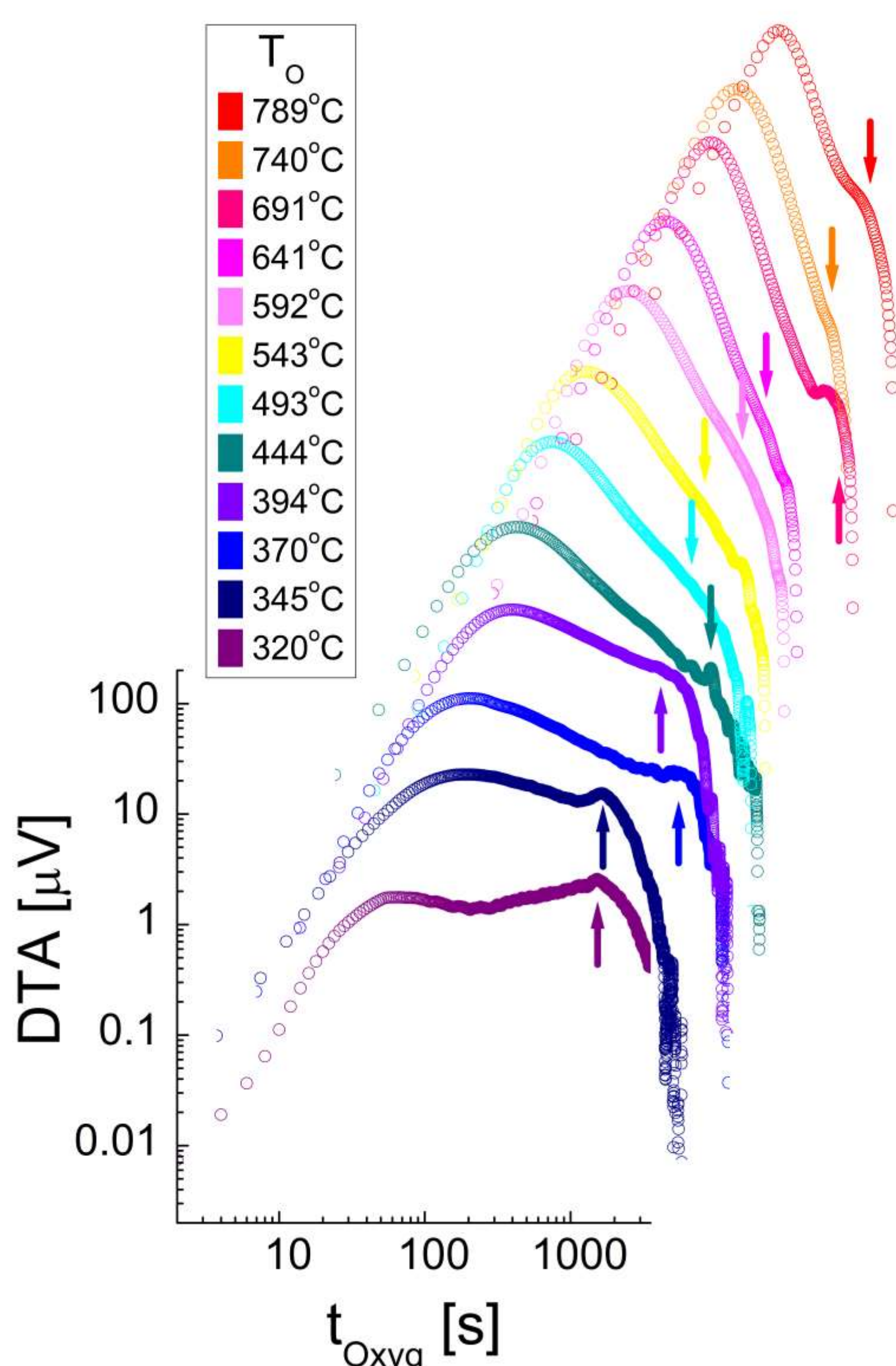
En este trabajo se muestra un análisis termogravimétrico a temperatura constante del proceso de oxigenación del material $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) a partir de polvo policristalino. Partiendo del material completamente desoxigenado ($\delta = 1$), se observa la transición Tetragonal-Ortorrónica (T-O), ocurrida durante el proceso de oxigenación del mismo, para diferentes temperaturas en el rango que va de 300°C a 800°C.[1]

La observación de la transición T-O a diferentes temperaturas nos permite dibujar el Diagrama de Fases del material en términos de Temperatura vs. δ . Un mecanismo de metaestabilidad, que extiende la fase tetragonal más allá de las fronteras de la línea de transición T-O, nos permite identificar la zona donde predomina la superestructura Orto-II, de largo alcance pero no de interacción 3-D.[2] Esta zona del diagrama de fases podemos observarla en nuestros

experimentos para temperaturas 100°C por encima de lo predicho teóricamente, posiblemente debido a impurezas en nuestras muestras.[3]

Finalmente, experimentos de Rayos-X realizados a nuestras muestras trabajadas a diferentes temperaturas (oxigenadas y sin oxigenar) muestran notables diferencias en función de la temperatura a la cual se haya alcanzado la fase Ortorrónica. Un pico extra en el difractograma de Rayos-X para muestras oxigenadas a bajas temperaturas (< 350°C) diferencia a estas de las obtenidas a mayor temperatura. Asociamos este orden extra en el material con un indicio de orden en la fase ortorrónica debido al paso por la zona con superestructura de orden Orto-II. Se discuten las posibilidades y por qué se descarta otro tipo de orden en el material.

Oxigenación - Análisis termo-gravimétrico diferencial (DTA-TG)



Valores medidos por termogravimetría diferencial para muestras de polvo de YBCO policristalino. El proceso de oxidación observado se muestra como un pico asociado a una reacción exotérmica. Un segundo pico, indicado con flechas, indica un nuevo mecanismo del tipo exotérmico que asociamos a una reactivación en la absorción de oxígeno por parte del material. Asociamos esto al ordenamiento en las posiciones de los oxígenos debido a la transición T-O presente en el material, que permite una segunda etapa de absorción de oxígeno por parte del mismo.

Diagrama de fases de la transición T-O

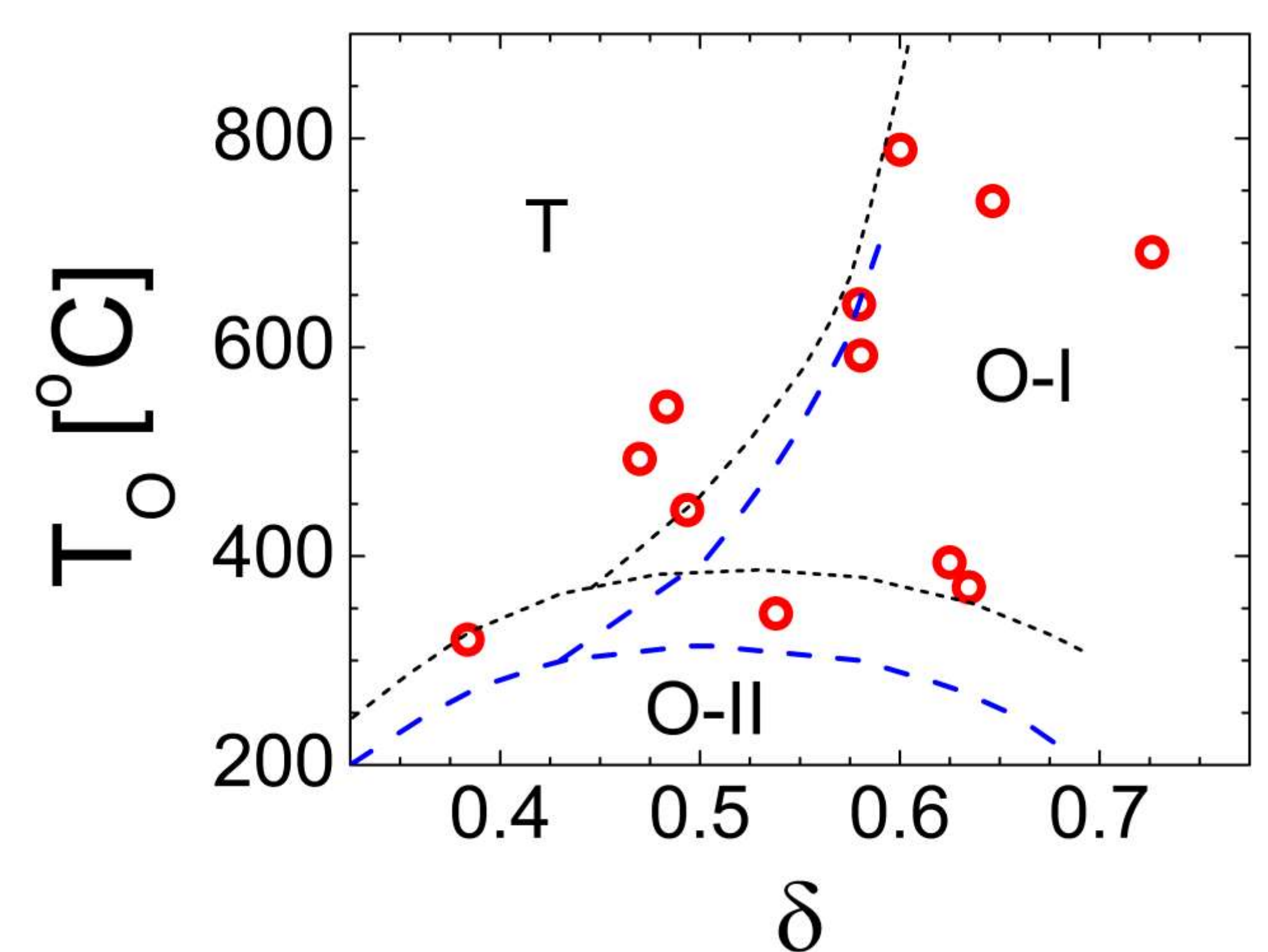
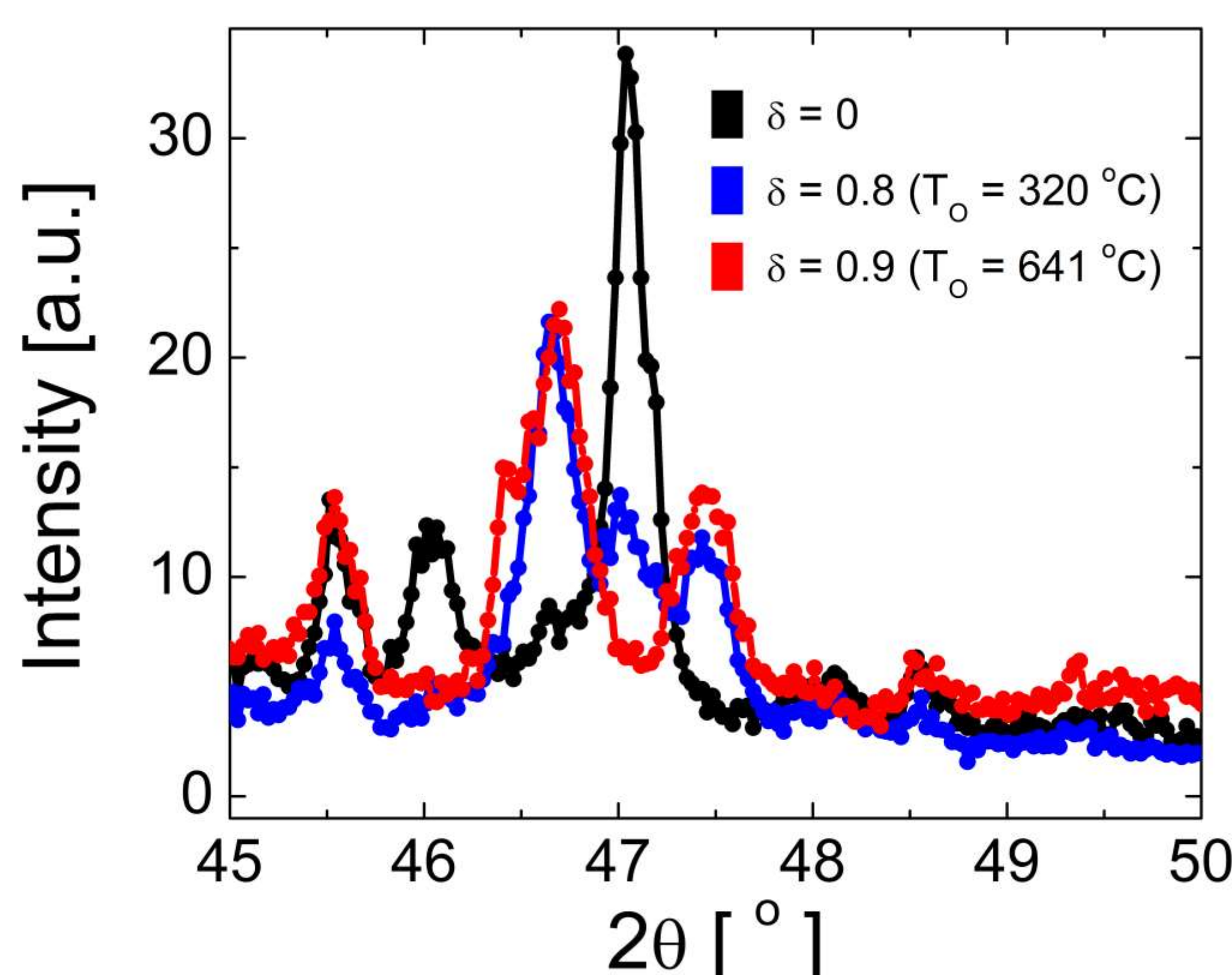


Diagrama de fases de la transición T-O dibujado a partir de los datos obtenidos por DTA-TG (segundo pico exotérmico en los datos). La línea de trazos en color azul indica los valores previamente reportados. Los datos medidos para este trabajo se indican en rojo, y presentan un desfase a temperaturas más altas, debido posiblemente a impurezas en el material. Los datos reportados aquí dibujan la zona correspondiente a la superestructura Orto-II (O-II).

Análisis de Rayos X



Resultados obtenidos por difracción de Rayos-X para polvo policristalino de YBCO en fase Tetragonal ($\delta = 0$) y en fase Ortorrónica ($\delta > 0.63$). Un máximo destacado para valores de $2\theta = 47^\circ$ con un máximo secundario para valores de $2\theta = 46^\circ$ caracterizan la fase Tetragonal del material. El doble pico para valores de $2\theta = 46.5^\circ$ y $2\theta = 47.5^\circ$ caracteriza la fase Ortorrónica del mismo. El pico extra observado para valores de $2\theta = 47^\circ$ en los datos a 320°C sin la presencia de un pico a $2\theta = 46^\circ$ no es compatible con la coexistencia de ambas fases en la oxigenación a estas temperaturas, por lo que se propone esto como una impronta de la superestructura Orto-II dentro de la fase Ortorrónica del material incluso para valores de $\delta = 0.8$.

Conclusiones

- Existen dos mecanismos diferentes en el proceso de oxigenación del YBCO: uno en su fase Tetragonal y otro en su fase Ortorrónica.
- Un análisis termogravimétrico sencillo y accesible nos permite observar ambos mecanismos de oxigenación en el material.
- Con estos resultados es posible construir el diagrama de fases de la transición T-O
- Para experimentos por debajo de 400 °C se observa un orden extra en la estructura cristalina del YBCO mediante experimentos de Rayos-X
- Proponemos esto como un indicio de orden en la fase Ortorrónica del material a esas temperaturas, debido a la presencia de la superestructura Orto-II en el camino empleado para llegar a ese estado.

Referencias

- [1] L. Gallo *et al.*, arXiv:2405.12650 (2024).
- [2] M. v. Zimmermann *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 104515 (2003).
- [3] G. Ceder *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 8698 (1990).