

ISSN 2222-5617

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

*Вісник
Харківського
Національного
Університету
імені В. Н. Каразіна*

Серія “Фізика”

Випуск 40

Серія започаткована 1998 р.

Харків 2024

Засновник і видавець
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Міністерства освіти і науки України

Наукове фахове видання України категорії «Б» в галузях наук:
10 Природничі науки за спеціальністю: 104 Фізика та астрономія
Наказ МОН України № 409 від 17.03.2020

Засновано у 1998 році
Періодичність виходу – 2 рази на рік

УДК 530.1/539.8

Вісник містить статті, присвячені сучасному стану теоретичних та експериментальних досліджень у галузі фізики, відомості з історії фізики.

Видання призначене для науковців, викладачів, аспірантів та студентів фізичних спеціальностей вищих закладів освіти та фахівців наукових установ.

Затверджено до друку рішенням Вченої ради Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна (протокол № 10 від 27 травня 2024 р.)

Головний редактор

Вовк Р. В. – академік НАН України, академік ТАНУ, доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Заступник головного редактора

Пойда В. П. – доктор техн. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Відповідальний секретар редколегії

Коршак В. Ф. – кандидат фіз.-мат. наук, доцент, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Технічний редактор

Шуринов Р. В. – кандидат фіз.-мат. наук, доцент, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Редакційна колегія

Бойко Ю. І. – доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Гуревич Ю. Г. – доктор фіз.-мат. наук, професор, Дослідницький центр, Мексика

Зиман З. З. – доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Лазоренко О. В. – доктор фіз.-мат. наук, доцент, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Пархоменко О. О. – доктор фіз.-мат. наук, с.н.с., ННЦ ХФТІ НАНУ, Україна

Петченко О. М. – доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ МГ ім. О.М. Бекетова МОН України

Портной М. Ю. – доктор фізики, професор, університет Ексетеру, Великобританія

Рошко С. М. – доктор фізики, професор, Лондонський центр нанотехнологій, Великобританія

Соколенко В. І. – доктор фіз.-мат. наук, завідувач відділом, ННЦ ХФТІ НАНУ, Україна

Хронеос Олександр – доктор фізики, професор, Імперіал коледж, Великобританія

Фегер Олександр – доктор фіз.-мат. наук, професор, інститут фізики університету імені Шафарика, Кошице, Словачія

Федоров П. М. – доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Шкловський В. А. – доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Шкуратов Ю. Г. – член-кореспондент НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Ямпольський В. О. – член-кореспондент НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, ХНУ імені В. Н. Каразіна, Україна

Адреса редакції:

Майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна, Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, фізичний факультет. Тел.: +38 (057)-707-56-76.

Тексти статей представлені в авторській редакції. Автори несуть повну відповідальність за зміст статей, а також добір, точність наведених фактів, цитат, власних імен та інших відомостей.

Ідентифікатор медіа у Реєстрі суб'єктів у сфері медіа: R30-04473 (Рішення № 1538 від 09.05.2024 р. Національної ради України з питань телебачення і радіомовлення. Протокол № 15)

ISSN 2222-5617

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

Journal of V. N. Karazin
Kharkiv
National
University

Series Physics

Volume 40

The series has started 1998 year

Kharkiv 2024

Founder and Publisher
V. N. Karazin Kharkiv National University
Ministry of Education and Science of Ukraine

Scientific professional publication of Ukraine, Category "B" in the fields of science:
10 Natural Sciences, specialty: 104 Physics and Astronomy
Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine No. 409 dated March 17, 2020

Established in 1998
Publication frequency – 2 times a year

UDC 530.1/539.8

The journal contains articles dedicated to the current state of theoretical and experimental research in the field of physics and information on the history of physics.

The publication is intended for researchers, educators, postgraduate students and students of physics disciplines in higher education institutions and specialists from scientific organizations.

Approved for publication by the decision of the Academic Council of Kharkiv Karazin National University. (Minutes № 10 dated 27 May 2024.

Editor-in-Chief

Vovk R. V. – Academician of the NAS of Ukraine, Academic TAU, Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Deputy Editor-in-Chief

Poida V. P. – Doctor of Science (Tech.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Executive Managing Editor

Korshak V. F. – Doctor of Philosophy (Phys.-Math.), Associated Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Technical Editor

Shurinov R. V. – Doctor of Philosophy (Phys.-Math.), Associated Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Editorial Board

Boiko Yu. I. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Gurevich Yu. G. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, Center for Research and Advanced, Mexico
Zyman Z. Z. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Lazorenko O. V. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Associated Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Parhomenko O. O. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, NSC "Kharkiv Institute of Physics & Technology", Ukraine
Petchenko O. M. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, O.M. Beketov National University of Urban Economy, Ukraine
Portnoi M. Yu. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, University of Exeter, UK
Rozhko S. M. – Doctor of Physics (Phys.-Math.), Professor, London Centre for Nanotechnology, UK
Sokolenko V. I. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Head of the department, NSC KIPT, Ukraine
Chronos A. – Doctor of Physics (Phys.-Math.) Professor, Imperial College, UK
Feher A. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Kosice, Slovakia
Fedorov P. M. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Shklovskij V. A. – Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Shkuratov J. G. – Corresponding Member of the NAS of Ukraine, Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine
Yampol'skii V. A. – Corresponding Member of the NAS of Ukraine, Doctor of Science (Phys.-Math.), Professor, V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Editorial address:

Svobody Sq. 4, 61022 Kharkiv, Ukraine, V. N. Karazin Kharkiv National University, Department of Physics, +38 (057)-707-56-76.

The texts of the articles are presented in the original edition. The authors are fully responsible for the content of the articles, as well as the selection and accuracy of the given facts, quotations, proper names and other information.

Media identifier in the Register of the field of Media Entities: R30-04473 (Decision № 1538 dated May 9, 2024 of the National Council of Television and Radio Broadcasting of Ukraine, Protocol № 15)

Content

<i>L. O. Pashchenko, O. L. Chykina, R. V. Vovk.</i> Structural relaxation and diffusion of the labile component in non-stoichiometrical cuprates $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Re = Y, HO) and associated oxides (overview)	7
<i>O. V. Lazorenko, A. A. Onishchenko, I. A. Taranova, M. A. Udovenko.</i> Peculiarities of Hurst exponent estimation for natural physical processes	25
<i>G. Ya. Hadzhai, V. F. Korshak, M. G. Revyakina, O. L. Chykina, A. O. Komisarov, O. Yu. Vragov, Junyi Du, L. O. Pashchenko, R. V. Vovk.</i> Evolution of the temperature dependences of electrical resistance of $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals in a wide range of applied pressure and concentrations of praseodmium impurities	35
<i>Yu. I. Boyko, V. V. Bogdanov, R. V. Vovk, B. V. Grinyov.</i> Photon irradiation and “high-temperature” electrical superconductivity of polycomponent metal-oxide compounds	41
<i>G. Ya. Hadzhai, V. F. Korshak, S. V. Savich, Junyi Du, R. V. Vovk.</i> Effect of high pressure on temperature dependence of pseudogap in $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals	47

METHODS OF TEACHING PHYSICS

<i>M. O. Makarovsky, O. M. Savchenko.</i> Peculiarities of teaching physics and astronomy at the faculty of physics in the conditions of distance learning	52
--	----

Зміст

<i>Л. О. Пащенко, О. Л. Чикіна, Р. В. Вовк.</i> Структурна релаксація і дифузія лабільної компоненти в нестехіометричних купратах $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ho}$) і супутніх оксидах (огляд)	7
<i>О. В. Лазоренко, А. А. Онищенко, І. А. Таранова, М. А. Удовенко.</i> Особливості оцінювання показника Херста для природних фізичних процесів	25
<i>Г. Я. Хаджсай, В. Ф. Коршак, М. Г. Ревякіна, О. Л. Чикіна, А. О. Комісаров, О. Ю. Врагов, Джуньї Ду, Л. О. Пащенко, Р. В. Вовк.</i> Еволюція температурних залежностей електроопору монокристалів $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в широкому інтервалі прикладеного тиску і концентрацій домішок празеодиму	35
<i>Ю. І. Бойко, В. В. Богданов, Р. В. Вовк, Б. В. Гриньов.</i> Опромінювання фотонами та «високотемпературна» електрична надпровідність полікомпонентних метал-оксидних сполук	41
<i>Г. Я. Хаджсай, В. Ф. Коршак, С. В. Савич, Джуньї Ду, Р. В. Вовк.</i> Вплив високого тиску на температурну залежність псевдощільності монокристалів $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$	47

МЕТОДИКА ВИКЛАДАННЯ ФІЗИКИ

<i>М. О. Макаровський, О. М. Савченко.</i> Особливості викладання фізики та астрономії на фізичному факультеті в умовах дистанційного навчання	52
--	----

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-01>

UDC: 53.04, 53.01/.09, 539.374+669.715, 548.4

PACS numbers: 74.72.-h, 62.20.de, 25.75.N

СТРУКТУРНА РЕЛАКСАЦІЯ І ДИФУЗІЯ ЛАБІЛЬНОЇ КОМПОНЕНТИ В НЕСТЕХІОМЕТРИЧНИХ КУПРАТАХ $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ho}$) І СУПУТНИХ ОКСИДАХ (огляд)

Л. О. Пащенко , О. Л. Чикіна, Р. В. Вовк 

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

E-mail: liubov.pashchenko@karazin.ua

Надійшла до редакції 05 квітня 2024 р. Переглянуто 21 травня 2024 р.

Прийнято до друку 25 травня 2024 р.

У роботі досліджено вплив відпалювання при кімнатній температурі на електроопір у базовій ab -площині $\rho(T)$ монокристалів $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ho}$) з нестачею кисню. Встановлено, що зниження вмісту кисню в матеріалі викликає фазову сегрегацію, що супроводжується дифузією лабільної компоненти та структурною релаксацією в об'ємі зразків, що підтверджує ключову роль кисневого дефіциту у визначенні структурних та електрофізичних властивостей цих матеріалів.

Відпалювання монокристалів $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при кімнатній температурі за умов різного дефіциту кисню приводить до розширення інтервалу лінійної залежності $\rho(T)$ і звуження температурної ділянки, де реалізується псевдоцілінний (ПЩ) режим. Це підкреслює важливість кисневої концентрації у формуванні електронної структури матеріалу. Надлишкова провідність підкоряється експоненціальній температурній залежності в широкому інтервалі температур, що свідчить про наявність нелінійних ефектів. Температурна залежність псевдоціліни добре описується в рамках теорії кросовера БКШ-БЕК, що підтверджує існування переходу між двома режимами поведінки в матеріалі.

Заміна ітрію на гольмій ($\text{Re} = \text{Ho}$) впливає на розподіл заряду в CuO -площинах, що приводить до розупорядкування в кисневій підсистемі. Це викликає зміни в електронній структурі, які проявляються зміщенням температурних ділянок, що відповідають переходам виду метал-діелектрик та реалізації псевдоцілінної аномалії. Таким чином, результати дослідження демонструють, що контроль кисневого вмісту та хімічного складу монокристалів $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ є ефективним інструментом для управління їх електрофізичними властивостями.

Отримані значення короткодіючих міжатомних потенціалів також можуть бути використані для систематичного дослідження комплексної поведінки та хімії дефектів у цих матеріалах на атомному рівні. Використання техніки моделювання взаємодії кристалічної ґратки, так званої «atomic scale techniques», дозволяє не тільки успішно визначати емпіричні шляхи поліпшення фізико-технічних параметрів різних рідкісноземельних оксидів (РЗО), але і перевіряти адекватність численних теоретичних досліджень, що проводяться останнім часом.

Ключові слова: монокристали $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, відпалювання, структурна релаксація, лабільний кисень, псевдоцілінна аномалія, перехід метал-діелектрик, супутні оксиди.

Як цитувати: Л. О. Пащенко, О. Л. Чикіна, Р. В. Вовк. Структурна релаксація і дифузія лабільної компоненти в нестехіометричних купратах $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ho}$) і супутніх оксидах (огляд). Вісник ХНУ імені В. Н. Каразіна. Серія «Фізика». Вип. 40, 2024, 7–24. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-01>

In cites: L. O. Pashchenko, O. L. Chykina, R. V. Vovk. Structural relaxation and diffusion of the labile component in non-stoichiometrical cuprates $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ho}$) and associated oxides (Overview). Journal of V. N. Karazın Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 7–24. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-01> (in Ukrainian).

ВСТУП

В останні роки однією з домінуючих версій виникнення ПЩ-аномалії у високотемпературних надпровідниках (ВТНП) є, так звана, кластерна модель [1, 2, 3]. Так, наприклад, у недавній теоретичній роботі [1] було встановлено, що критична температура T_c і температура відкриття псевдощілини T^* у сполуці $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ однозначним чином пов'язані з розмірами надпровідних кластерів, утворених іонами кисню, що формують негативні U-центри (NUC), відповідальні за генерацію носіїв у сполуках. При цьому стверджується, що спостережувана в різних експериментах псевдощілина є ні чим іншим, як тією ж надпровідною щільною, але виникає при $T > T_c$ в результаті великих флуктуацій числа частинок між парним рівнем NUC і кисневої зоною [1]. При цьому передбачається, що при зменшенні рівня допування киснем середній розмір кластерів зменшується і відносні флуктуації заселеності NUC в цих кластерах нарастають, що, в свою чергу, повинно викликати зростання T^* і зниження T_c [1]. У роботі [2] в рамках домішкового механізму високотемпературної надпровідності в припущенні, що в області, прилеглій до надпровідної фази з боку допінгу, менше оптимального (псевдощілинної області), існують кінцеві надпровідні кластери, а межа надпровідної фази відповідає порогу існування нескінченного надпровідного кластера, була отримана верхня межа псевдощілинного стану як функція допінгу. У роботі Абрикосова [3] зроблено спробу пояснити псевдощілинний стан на основі теорії перколяції в припущенні, що довжина когерентності пропорційна $T^* - T$. Серед експериментальних робіт, присвячених цьому питанню, слід відзначити експерименти, в яких кластери в ВТНП спостерігалися за допомогою скануючої тунельної спектроскопії [4, 5], а також роботи [6–9], присвячені дослідженням процесів кисневого упорядкування. Однак, незважаючи на значний накопичений літературний матеріал, досі не до кінця ясними залишаються як сама природа структурних кластерних аномалій, так і механізми їх формування у ВТНП.

Найбільш перспективними для дослідження в цьому питанні є сполуки $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Це обумовлено низкою причин: цей надпровідник має високу критичну температуру і найкращу токонесучу здатність в сильних магнітних полях; можна відносно легко отримати однофазні керамічні та литі зразки; їх фізичні властивості, у тому числі і надпровідні, можна легко змінити, варіюючи кисневий індекс δ [10] або легуванням; є можливість отримувати високоякісні монокристали відносно великих розмірів. Остання обставина має вирішальне значення для фундаментальних досліджень.

Сукупність досліджень різних фізичних

властивостей сполук $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [10–14], показує наявність в них нерівноважного стану при досить значній мірі дефіциту кисню, що може бути індуковано за допомогою докладання високого тиску [11–14] або стрибкоподібної зміни температури [10] і супроводжується процесами структурної релаксації. Це, в свою чергу, повинно відображатися на низці фізичних властивостей надпровідника, у тому числі електропровідності.

Наскільки нам відомо, до теперішнього часу в літературі практично відсутні дані про експериментальні дослідження впливу перерозподілу лабільного кисню в нерівноважному стані (при фіксованій концентрації кисню у зразку) на ПЩ-аномалію в системі 1-2-3 при заміні ітрію на інші рідкоземельні елементи. Враховуючи вищесказане, у цьому розділі було проведено дослідження впливу перерозподілу лабільного кисню на критичну температуру і псевдощілину в монокристалах $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($Re = Y, Ho$) сильно недодопованного складу.

У підрозділі 1 наведено літературні дані про характер перерозподілу лабільної компоненти, індукованого зовнішнім впливом. У підрозділі 2 викладаються оригінальні авторські результати дослідження особливостей релаксації поздовжнього електроопору сильно недодопованих киснем монокристалів $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($Re = Y, Ho$) у процесі їх відпалу при кімнатних температурах. У підрозділі 3 розглядається атомістичне моделювання дифузії Li^+ в Y_2O_3 і супутніх оксидах.

1. Перерозподіл лабільного кисню і еволюція резистивних характеристик монокристалів $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ у процесі їх термообробки при низьких температурах

Дослідження надпровідних [1–7] і оптичних [8–9] властивостей загартованих від високих температур монокристалів $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з дефіцитом кисню $\delta \approx 0.5–0.6$ показали, що ці властивості залежать не тільки від величини кисневого індексу, а й від часу їх відпалу при кімнатній температурі. Так, наприклад, відпал при кімнатних температурах призводить до збільшення критичної температури T_c , яке, залежно від величини кисневого індексу, може досягати значення $\Delta T_c \approx 15\text{ K}$ [6–7].

Оптичні дослідження показують [8–9], що в процесі відпалу при кімнатній температурі спостерігається збільшення відбивної здатності монокристалів, яке автори пояснювали зростанням концентрації носіїв струму.

Нейтроннографічні дослідження [5] керамічних зразків $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, загартованих від температури 773 K, свідчать про зміну параметрів ґратки у процесі відпалу зразків при кімнатній температурі: всі

параметри кристалічної ґратки зменшуються (рис. 1), а ступінь орторомбічності ($a-b$) – збільшується (рис. 2). При цьому, однак, не спостерігається істотної зміни коефіцієнта заповнення кисневих позицій у Cu-O площині уздовж осей a і b . Основні зміни критичної температури (рис. 2), параметрів кристалічної ґратки (рис. 1) та відбивної здатності у процесі відпалу спостерігаються на початковій стадії відпалу: приблизно 85% від загальної величини зміни цих характеристик реалізується протягом першої доби.

Вплив відпалу при кімнатних температурах на критичну температуру, концентрацію носіїв струму та на зміну параметрів решітки кисневодефіцитних зразків $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ інтерпретується упорядкуванням атомів кисню у площині Cu-O без зміни вмісту кисню у зразку. При цьому виникає три питання: (1) чим обумовлено збільшення критичної температури (упорядкуванням кисню або зміною параметрів кристалічної решітки); (2) в області яких значень δ реалізується упорядкування; і (3) який характер упорядкування та який характерний масштаб цього впорядкування.

Відомо, що саме аномально велике збільшення критичної температури надпровідника $LaBaCuO$ при впливі гідростатичного тиску P , $dT_c/dP = 0.64$ К/кбар [15], стимулювало пошук нових надпровідників, у яких шари Cu-O зближені за рахунок "внутрішнього тиску", обумовленого малим радіусом іонів, які розділяють ці шари. У надпровіднику $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ барична похідна критичної температури не постійна і залежить від індексу δ . При цьому величина похідної максимальна при $\delta \approx 0.4-0.5$ і становить $(0.1 \div 1)$ К/кбар [16–18]. Тому незначне зменшення параметрів ґратки у процесі низькотемпературного відпалу може призвести до істотного збільшення критичної температури. З іншого боку, автори роботи [6] пов'язують збільшення T_c саме зі зміною локального оточення атомів міді у площинах Cu-O, яке призводить до перерозподілу заряду в цих площинах.

Дослідження впливу кисневого індексу на збільшення критичної температури у процесі низькотемпературного відпалу [7] показало, що величина ΔT_c зменшується зі зменшенням δ , а при $\delta \approx 0.2$ ніяких змін величини T_c у процесі відпалу не спостерігалось. Необхідно однак зазначити, що величина T_c не чутлива до зміни кисневого індексу при $\delta \leq 0.2$ [6], і, тому, питання про можливість перерозподілу кисню у зазначеному інтервалі зміни δ вимагає додаткових досліджень.

Структура $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при $\delta \approx 0$ характеризується наявністю Cu-O ланцюжків, тобто кисневі позиції O (1) повністю заповнені, а позиції O (5) вакантні. При дефіциті кисню $\delta \approx 0.5$ структура характеризується послідовним чергуванням ланцюжків, у яких кисневі позиції O (1) повністю заповнені, і ланцюжків, у яких

позиції O (1) вакантні.

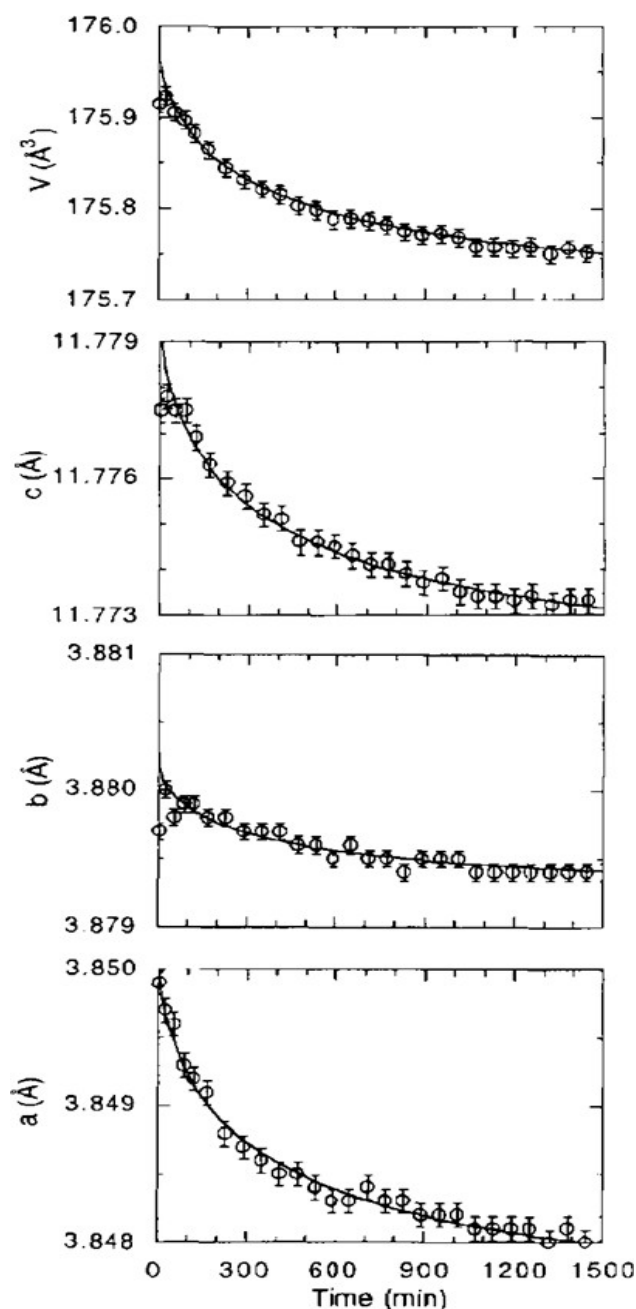


Рис. 1. Залежність об'єму та параметрів елементарної комірки від часу відпалу при кімнатній температурі для загартованого зразка $YBa_2Cu_3O_{6.41}$.

Fig. 1. Dependence of the unit cell volume and parameters on the annealing time at room temperature for the hardened sample $YBa_2Cu_3O_{6.41}$.

Реалізація впорядкованих структур такого типу можлива при стехіометричному співвідношенні концентрацій кисню і вакансій [19–20], яке в наведених прикладах дорівнює 1:0 і 1:1. Експериментальні дослідження різних фізичних властивостей зразків $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з дефіцитом кисню

$\delta \approx 0.4$ дозволили авторам роботи [21] обґрунтувати уявлення про надпровідний кластер, структура якого близька до впорядкованої при співвідношеннях концентрацій кисню і вакансій рівних 5:1, 4:1, 3:1 і 2:1. Наприклад, вважається, що при співвідношенні 5:1 на кожному шостому ланцюжку кисневі позиції О (1) вакантні, а в інших ланцюжках вони зайняті.

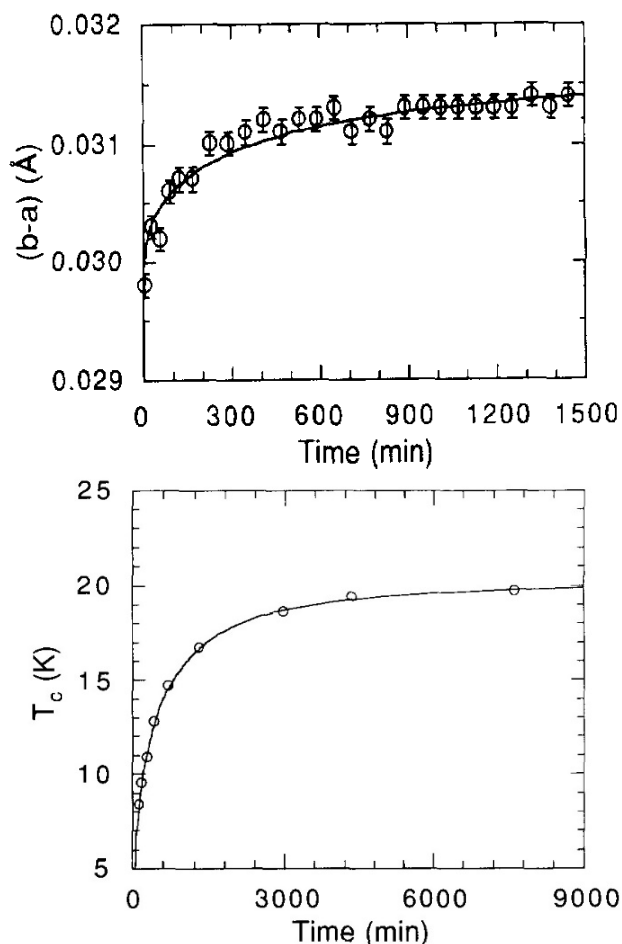


Рис. 2. Залежність різниці $(b-a)$ і критичної температури T_c від часу відпалу при кімнатній температурі для загартованого зразка $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.41}$. Критичну температуру визначали по початку прояву діамagnetного відгуку.

Fig. 2. Dependence of the difference $(b-a)$ and the critical temperature T_c on the annealing time at room temperature for the hardened sample $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.41}$. The critical temperature was determined by the onset of the diamagnetic response.

При нестехіометричному співвідношенні концентрацій кисню і вакансій можливе або розупорядкування в системі кисень-вакансія, або виникнення суміші впорядкованих фаз-кластерів. Це питання залишається відкритим.

Результати робіт [8] вказують на існування

впорядкованого стану при кімнатній температурі. Однак масштаб упорядкування, отриманий з нейтронографічних досліджень (≈ 30 Å), на порядок величини менше значення 300 Å, отриманого з оптичних досліджень [9] (див. рис. 3). Слід також відзначити можливість зміни стану кисневої підсистеми при низькотемпературному загартованні від температур $T_a = 100 \div 300$ К. Дослідження впливу гартування на електроопір і критичну температуру зразків з $T_c \approx 91$ К [22] свідчить про збільшення T_c і зменшення питомого електроопору ρ в площині (a,b) . Величина зміни T_c і ρ залежала як від величини T_a , так і від часу витримки при T_a . Отримані результати автори інтерпретували мікродифузійним механізмом формування стану ґратки з підвищеним значенням T_c . Характер зміни ρ залежно від величини T_a свідчив про розупорядкованість вихідного стану кисневих вакансій і їх подальше впорядкування.

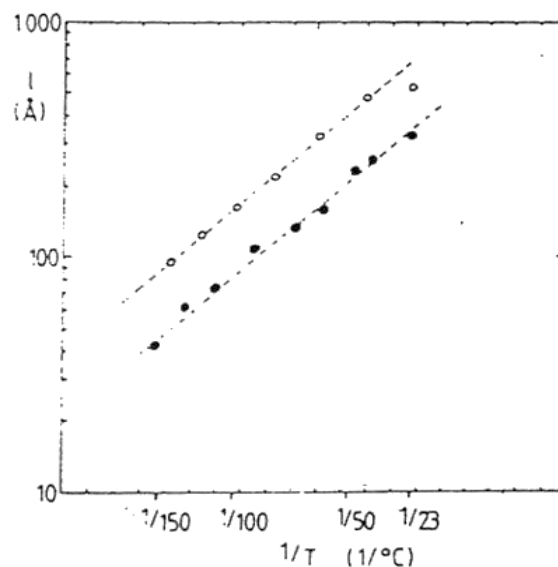


Рис. 3. Середня довжина ланцюжків в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ (заштриховані кільця) і $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ (порожні кільця) як функція зворотної температури [9].

Fig. 3. Average length of chains in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ (shaded circles) and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ (open circles) as a function of inverse temperature [9].

Слід також зазначити, що при резистивних вимірах перехід до ПЩ-режиму проявляється в більш швидкому, ніж лінійне, падінні величини електроопору в базисній площині $\rho(T)$ (якщо так званої надлишкової провідності) при зниженні температури нижче деякого характерного значення T^* , яке спостерігається у ВТНП-зразках недопованого складу. Оскільки електроопір таких сполук вельми чутливий до стану кисневої підсистеми, перерозподіл лабільної компоненти повинен відображатися на температурних залежностях $\rho(T)$. Наскільки нам

відомо, до теперішнього часу в літературі не публікувалися результати експериментальних досліджень впливу перерозподілу лабільного кисню в нерівноважному стані (при фіксованій концентрації кисню у зразку) на ПЩ-аномалію в системі 1-2-3.

2. Релаксація позовжньої провідності і температурна залежність псевдоцілини в нестехіометричних монокристалах $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($Re = Y, Ho$)

Як уже було зазначено, при вимірах електроопору перехід до ПЩ-режиму проявляється в більш швидкому, ніж лінійне, падінні величини електроопору в базисній площині $\rho(T)$ (появи так званої надлишкової провідності), при зниженні температури нижче деякого характерного значення T^* (верхньої межі псевдоцілиного стану) [23–28]. У нашій недавній роботі [28] досліджувався вплив відпалу при кімнатних температурах на надлишкову провідність бездвійникового монокристала $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з малим відхиленням від стехіометрії за киснем. При цьому було виявлено, що у процесі відпалу при кімнатних температурах протягом близько чотирьох діб відбувається загальне відносне розширення області існування псевдоцілиного режиму, а абсолютна величина псевдоцілини зменшується приблизно на 10%. Разом з тим, з урахуванням вищесказаного, найбільш інформативним видається вивчення саме зразків зі зниженим вмістом кисню, оскільки це не тільки дозволяє прояснити роль і вплив структурної релаксації на формування псевдоцілиного і надпровідного станів, але й дає нам можливість моделювання провідних характеристик і критичних параметрів надпровідника.

Як відомо, заміна Y іншими рідкоземельними елементами (за винятком празеодиму) у разі оптимально допованих киснем зразків [29], не зумовлює істотного впливу на надпровідні властивості. З іншого боку, для зразків з дефіцитом кисню, іон Re ($Re = Nd, La$) з великим радіусом вельми істотно впливає на розподіл заряду між CuO -площинами та ефективну взаємодію в напрямку осі a [30], тим самим стимулюючи розупорядкування кисню в ланцюжках CuO . При цьому у сполуках $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (Re – рідкісноземельний іон) Re може служити як датчик, чутливий до локальної симетрії його оточення, що, в свою чергу, впливає на кристалічне поле і розподіл щільності заряду. Крім цього при заміні ітрію на інші рідкоземельні елементи з великим іонним радіусом відбуваються значні якісні зміни в залежностях $T_c(\delta)$. Це, в свою чергу, сприяє появі нових незвичайних видів надструктур, наприклад, так званої "herringbone" в разі сполуки $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з $Re = Nd, La$ при $\delta \sim 0.5$ [14]. Особливий інтерес, у

цьому аспекті, викликає заміна ітрію на гольмій, який має досить великий (більше 10 мВ) магнітний момент, що забезпечує парамагнетизм сполуки у нормальному стані [29]. Проте, як і у випадку інших рідкоземельних елементів, при здійсненні заміни Y на парамагнітні іони $Re = Ho, Dy$ надпровідні властивості сполук $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при $\delta \leq 0.1$ не змінюються істотним чином [29]. Це, мабуть, пов'язано з локалізацією цих іонів далеко від надпровідних площин, що, в свою чергу, перешкоджає утворенню дальнього магнітного порядку.

Монокристали $ReBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($Re = Y, Ho$) вирощували за розчин-расплавною технологією в золотому тиглі. Для проведення резистивних вимірювань були відібрані три кристали K1, K2 ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) і K3 ($HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$). Електричні контакти створювали за стандартною 4-х контактною схемою шляхом нанесення срібної пасти на поверхню кристала з подальшим підключенням срібних провідників діаметром 0.05 мм і тригодинним відпалом при температурі 473 К в атмосфері кисню. Така процедура дозволяла отримувати перехідний опір контактів менше одного Ома і проводити резистивні вимірювання при транспортних струмах до 10 мА в аб-площині. Вимірювання проводили в режимі дрейфу температури при двох протилежних напрямках транспортного струму для виключення впливу паразитного сигналу. Температуру вимірювали платиновим терморезистором, напругу на зразку і зразковому опорі – нановольтметрами В2-38. Дані з вольтметрів через інтерфейс автоматично передавалися на комп'ютер. Критичну температуру, визначали в точці максимуму на залежностях $d\rho(T)/dT$ в області надпровідного переходу за методикою [23, 28, 33].

Для зменшення вмісту кисню зразки відпалювали протягом доби при температурі 953 К і 963 К ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) і 873 К ($HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) в атмосфері повітря. Після відпалу кристали охолоджували до кімнатної температури протягом 2–3 хв, вмонтовували у вимірювальній комірці і охолоджували до температури рідкого азоту протягом 10–15 хв. Усі вимірювання проводили на відігріванні зразка. Для дослідження впливу відпалу при кімнатній температурі зразок, після першого виміру $\rho(T)$, витримували протягом декількох годин при кімнатній температурі і проводили повторні вимірювання. Така процедура повторювалася кілька разів. Остання серія вимірювань була проведена після додаткової витримки зразка при кімнатній температурі протягом 5 діб.

2.1. Релаксація нормального електроопору і еволюція форми резистивних переходів у нормальний стан

Температурні залежності електроопору і

резистивні переходи в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ і $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ позначені кривими 1 на рис. 4. Криві 1 виміряні безпосередньо після пониження температури, а криві 2 і 3 – після поетапного відпалу при кімнатних температурах протягом 20 годин і 5 діб, відповідно, без зміни вмісту кисню в об'ємі експериментальних зразків.

Видно, що критичні температури, що визначаються по середині надпровідного переходу, дорівнюють 40 K і 45 K для першого та другого і 71 K для третього кристалів. Після першого виміру залежностей $\rho(T)$ зразки відігрівали до кімнатної температури. Через 20 годин проводили повторне вимірювання (криві 2). Видно, що через 20 годин після витримки зразків при кімнатній температурі їх електроопір знизився, а критична температура зросла. Після подальшої витримки зразків при кімнатній температурі протягом 3 діб електроопір виходив на насичення (криві 3). Частина кривих на рис. 4 не вказано, щоб не ускладнювати загальну картину.

Слід зазначити, що зменшення вмісту кисню, крім пониження T_c , призводить до трансформації форми залежностей $\rho(T)$, яка виражається в переході від квазіметалевої поведінки кривих, характерної для оптимально допованих зразків [23, 28, 31], до залежностей з характерним термоактиваційним прогином. При цьому у кристала K1 лінійна ділянка залежності $\rho(T)$ не спостерігалась у всьому дослідженому нами інтервалі температур, а у кристалів K2 і K3 – значно звужилася у порівнянні з оптимально допованими киснем зразками. Водночас видно, що в міру збільшення часу відпалу відбувається істотне розширення лінійної ділянки залежності $\rho(T)$ в області високих температур. Останнє відображається у зниженні величини температури T^* , при якій починається систематичне відхилення експериментальних точок вниз від лінійної залежності (рис. 4 (c)). Згідно із сучасними уявленнями T^* відповідає температурі відкриття псевдощільни [23–26]. З відповідних вставок до рис. 4 видно, що надпровідний перехід зразків на кривих 1 у всіх випадках має яскраво виражену ступінчасту форму, яка помітно згладжується в міру відпалу. При цьому слід зазначити, що всі основні зазначені вище зміни відбуваються протягом першої доби відпалу.

Зменшення електроопору при кімнатній температурі після швидкого охолодження кристалів від температур 873–973 K може бути викликано декількома причинами. З одного боку – релаксацією термомеханічних напружень, що виникають при швидкому охолодженні.

Як відомо, релаксація напружень в монокристалах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ здійснюється за допомогою двійникування. Відстань між двійниками становить 10^3 – 10^4 Å. Довжина вільного пробігу носіїв у

стехіометричних за киснем зразках оцінюється рівною 50–500 Å [32], а в киснедефіцитних зразках вона ще менше.

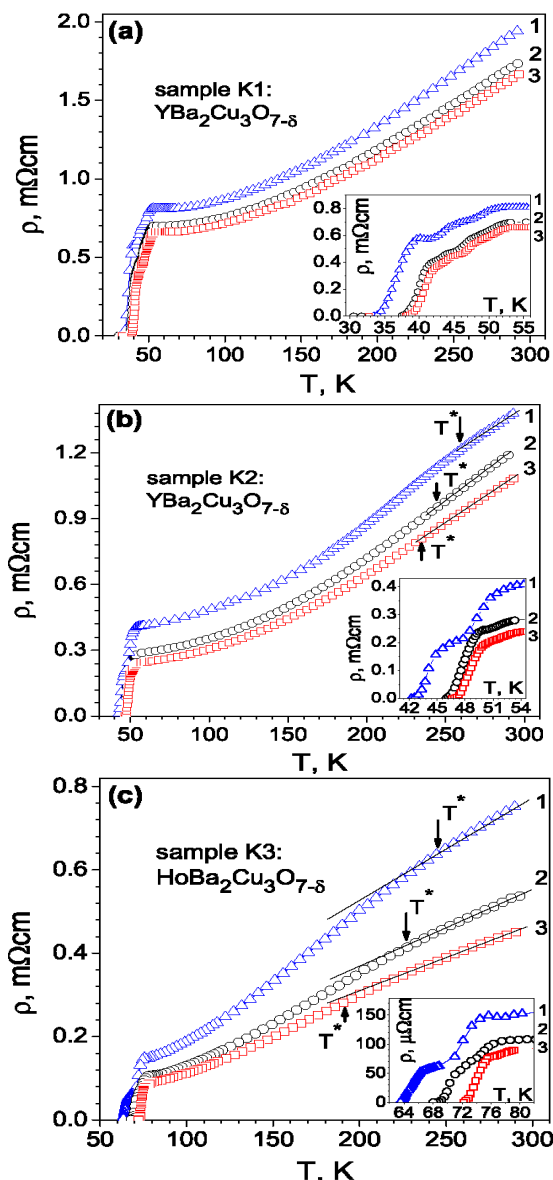


Рис. 4. Температурні залежності електроопору в базисній аб-площині $\rho(T)$ монокристалів $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (a, b) і $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (c). На відповідних вставках показані резистивні переходи в надпровідний стан.

Fig. 4. Temperature dependences of electrical resistance in the basic ab-plane $\rho(T)$ of single crystals $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (a, b) and $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (c). The corresponding insets show resistive transitions to the superconducting state.

Тому зменшення електроопору складно пояснити релаксацією термомеханічних напружень, оскільки, як видно з рис. 4, зміна електроопору може досягати 40 %. Крім того можливість виникнення істотних термомеханічних напружень видається сумнівною, враховуючи малі розміри досліджуваних зразків

($2 \times 0.5 \times 0.05$ мм³). З іншого боку, найбільш імовірною причиною зменшення електроопору може бути перерозподіл лабільного кисню в площинах Cu(1)-O(1). Наприклад, невпорядкований високотемпературний розподіл атомів O(1) змінюється впорядкованим розподілом при низьких температурах. Таке пояснення видається достовірним, якщо врахувати високий залишковий електроопір кристалів з дефіцитом кисню, який свідчить про великий внесок в електроопір розсіювання на дефектах структури і велику його зміну (до 40%) у процесі виходу на насичення. При цьому швидкість релаксації електроопору істотно залежала від температури, що свідчить про термоактиваційний характер процесу релаксації.

2.2. Термоактиваційна провідність та псевдощілина

Як зазначалося вище, із порівняння форми кривих оптимально допованих [23, 28] та недопованих киснем зразків випливає, що зниження вмісту кисню призводить до переходу від квазіметалевого ходу залежностей $\rho(T)$ до залежностей з характерним термоактиваційним прогином. Водночас, у разі кристала K3, крім експоненційної ділянки (істотно більш вузької порівняно з кристалом K1 і K2) при подальшому зниженні температури спостерігається систематичне відхилення $\rho(T)$ від лінійної залежності, що, як зазначалося в попередньому розділі, може служити достовірною ознакою реалізації в системі переходу метал-діелектрик «андерсонівського» типу.

Дійсно, як показав проведений аналіз наших експериментальних даних, в області температур, в якій спостерігається систематичне відхилення експериментальних точок від лінійної залежності в координатах $\ln[\rho/T] - 1/T$, наші криві досить добре описуються за допомогою асимптотичної залежності виду: $1/\rho T^{1/3}$ (вставка до рис. 5 (c)).

Як зазначалося раніше, перехід Андерсона може реалізовуватися також і в речовинах, що не є аморфними, але водночас володіють певним ступенем невпорядкованості. У сполуках системи 1-2-3 роль такого фактора може грати розупорядкування лабільної компоненти [28, 33, 31].

У цьому випадку нас цікавить питання, яким чином вищевказані особливості можуть бути пов'язані з проявом ПЩ-аномалії, про яку йшлося у вступній частині роботи.

Згідно з [34], появу ПЩ (або мінімуму щільності станів) можна очікувати в разі, якщо смуга провідності і валентна смуга у сполуці слабо перекриваються. Така ситуація може реалізуватися, зокрема, у випадку, коли змінюється середня відстань між атомами, склад або координаційне число, що супроводжує перехід метал-ізолятор [34].

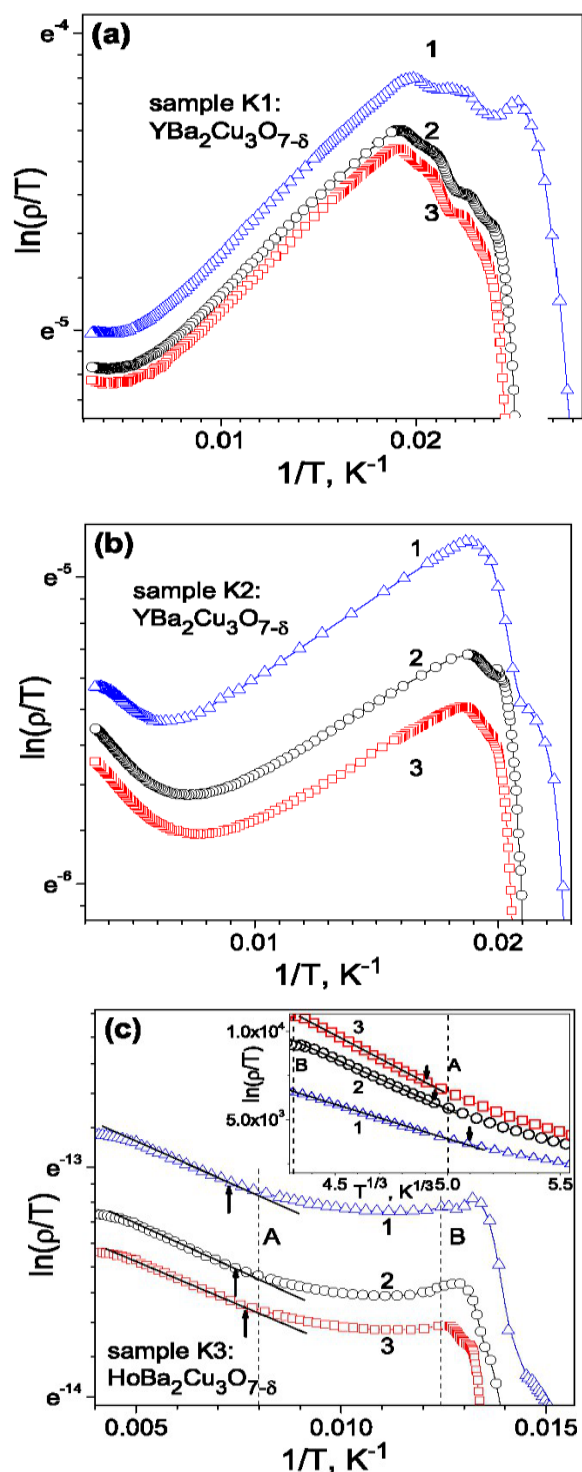


Рис. 5. Температурні залежності електроопору в базисній ab-площині $\rho(T)$ монокристалів $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (a, b) та $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (c) в координатах $\ln[\rho/T] - 1/T$. Позначення відповідають рис. 4. На вставці до рис. 5 (c) показані ті ж залежності в координатах $1/\rho T^{1/3}$.

Fig. 5. Temperature dependence of electrical resistance in the basic ab-plane $\rho(T)$ of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (a, b) and $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (c) single crystals in coordinates $\ln[\rho/T] - 1/T$. The designations correspond to Figs. 4. In the inset to fig. 5 (c) shows the same dependencies in coordinates.

Згідно з домішковою моделлю високотемпературної надпровідності [25], у ВТНП-сполуках подібна ситуація може реалізовуватися за рахунок існування в системі значного числа кисневих вакансій, які можуть захоплювати електрон у іона O^{2-} і разом з сусіднім іоном O^- утворювати дворівневу систему з локалізованою на ній парою електронів. При цьому розмір дворівневої системи є мінімальною довжиною когерентності, а критична температура визначається співвідношенням [25]:

$$T_c \propto \{E_1 - E_2 - 0.5(W_1 - W_2)\} / k_B,$$

де W_1 , W_2 – ширини смуг (зон), утворених при перекритті хвильових функцій сукупності всіх електронів, що знаходяться на енергетичних рівнях E_1 і E_2 такої дворівневої системи. Куперовськими парами є пари електронів з протилежно спрямованими спінами на нижніх рівнях цих дворівневих систем, які когерентно рухаються при $T < T_c$. Водночас при $T > T_c$ щілина між смугами не зникає, що і пояснює появу псевдощілини [25].

2.3. Вплив відпалу на температурну залежність псевдощілини

Як видно з рис. 4, характерною особливістю залежностей $\rho(T)$ наших зразків є наявність достатньої протяжної лінійної ділянки (при $T > 171$ К у монокристалі К3 і $T > 234$ К – у К2. Як зазначалося вище, у кристалі К1 не вдалося достовірно ідентифікувати лінійну ділянку в дослідженому нами діапазоні температур, що відповідає нормальному стану системи [24–26]. Нижче характеристичної температури T^* вимірюване $\rho(T)$ відхиляється від лінійної залежності в бік менших значень, що приводить до виникнення надлишкової провідності:

$$\Delta\sigma = [\rho(T) - \rho_N(T)] / [\rho(T) \times \rho_N(T)], \quad (1)$$

де $\rho_N(T) = \alpha T + b$ – опір зразка в нормальному стані, екстрапольований в область низьких температур.

Криві 1 отримані безпосередньо після пониження температури, а криві 2 і 3 – після поетапного відпалу при кімнатних температурах протягом 20 годин і 5 діб відповідно.

Частину кривих на рисунку не показано, щоб не ускладнювати загальну картину. Пунктирними лініями показані залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), -2 , -5 , -10 (межа БЕК) – пунктирними лініями (4–7).

Як було показано в попередньому розділі, апроксимація експериментальних залежностей $\Delta\sigma(T)$ може бути здійснена за допомогою співвідношення:

$$\Delta\sigma \sim (1 - T/T^*)\exp(\Delta^*_{ab}/T), \quad (2)$$

де Δ^*_{ab} – величина, що визначає деякий термоактиваційний процес через енергетичну щілину – «псевдощілину». У цьому випадку, надлишкова провідність виявляється пропорційною щільності надпровідних носіїв $n_s \sim (1 - T/T^*)$ і обернено пропорційною числу пар $\sim \exp(-\Delta^*/kT)$, зруйнованих тепловим рухом.

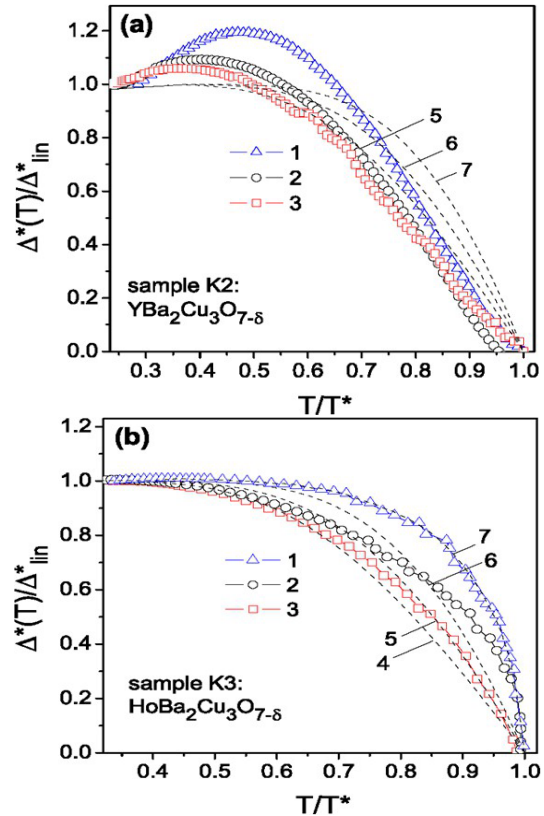


Рис. 6. Температурні залежності псевдощілини монокристалів К2(а) і К3(б) у наведених координатах $\Delta^*(T)/\Delta^*_{lin} - T/T^*$. Пунктирними лініями показані залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), -2 , -5 , -10 (межа БЕК) – пунктирними лініями (4–7).

Fig. 6. Temperature dependence of the pseudogap of K2 (a) and K3 (b) single crystals in the given coordinates $\Delta^*(T)/\Delta^*_{lin} - T/T^*$. Dotted lines show the dependences of $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ on T/T^* , calculated for values of the crossover parameter $\mu/\Delta(0) = 10$ (BKS limit), -2 , -5 , -10 (BEC limit) – dashed lines (4–7).

На рис. 5 показані температурні залежності псевдощілини в наведених координатах $\Delta^*(T)/\Delta^*_{lin} - T/T^*$ (Δ^*_{lin} – значення Δ^* на плато вдалині від T^* [93]), отримані безпосередньо після пониження вмісту кисню (крива 1), а також після поетапного відпалу експериментальних зразків при кімнатних температурах без зміни вмісту кисню в об'ємі кристала (криві 2, 3). Частину кривих на рисунку не наведено,

щоб не ускладнювати загальну картину. Залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані згідно, в наближенні середнього поля в рамках теорії кросовера БКШ-БЕК для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), -2 , -5 , -10 (межа БЕК) показано на рис. 6 пунктирними лініями.

Видно, що у разі монокристала K3 температурні залежності псевдощільни показують досить задовільну згоду з теорією [35]. Водночас, для монокристала K2 досить значна розбіжність експериментальних залежностей з теорією [35]; спостерігається в разі кривої 1, отриманої безпосередньо після пониження вмісту кисню. При цьому характерний максимум, який спостерігається для цього зразка, може бути обумовлений переходом до, так званого, SDW-режиму, як це вже спостерігалось в [35] для недодопованих зразків нових ВТНП-сполук системи $SmFeAsO$. Згідно з [35], всі перераховані вище особливості можуть бути обумовлені загальним зміщенням провідної підсистеми в область фазової діаграми, в якій властивості нормального стану визначаються антиферомагнітними кореляціями, а також посиленням ролі інших специфічних механізмів квазічастинкової взаємодії (див., наприклад [36–40]). Тут слід зазначити, що використана нами в цій роботі експериментальна методика, пов'язана з вимірюванням такої інтегральної характеристики як електроопір, не дозволяє в достатній мірі достовірності прямо визначати ступінь впливу антиферомагнітних кореляцій на надлишкову провідність і псевдощільну. З іншого боку, як зазначалося вище, згідно з сучасним уявленням, антиферомагнітні переходи спінів зазвичай призводять до появи чітко виражених максимумів на залежностях $\Delta^*_{ab}(T)$ [35], що спостерігається на наших експериментальних кривих, отриманих безпосередньо після пониження вмісту кисню.

Видно, що в міру зростання часу відпаду при кімнатній температурі, для всіх зразків відбувається зміщення експериментальних кривих. При цьому слід зазначити, що температура відкриття псевдощільни T^* істотно зміщується в бік низьких температур (див. рис. 3 та рис. 4), що відповідає розширенню лінійної ділянки залежності $\rho(T)$. Така поведінка виявляється якісно подібною ефекту трансформації температурних залежностей псевдощільни зразків $YBaCuO$, що спостерігається у разі докладання високого гідростатичного тиску. Очевидно, що згадані кореляції в поведінці кривих $\Delta^*(T)$ не є випадковими. Дійсно, як добре відомо з літератури (див., наприклад, [33]), докладання високого тиску до зразків ВТНП-системи 1-2-3, так само як і перерозподіл кисню в процесі відпаду [28], призводить до поліпшення провідних характеристик, яке виражається у

збільшенні абсолютної величини T_c і істотному зниженні питомого електроопору. Таким чином, враховуючи деяку умовність визначення величини відкриття псевдощільни T^* по відхиленню залежності $\rho(T)$ від лінійної поведінки, згоду експерименту з теорією в нашому випадку можна вважати задовільною.

2.4. Релаксація критичної температури і кластеризація лабільного кисню

Як було показано в теоретичній моделі [25], температура відкриття псевдощільни T^* однозначним чином пов'язана з розмірами надпровідних кластерів, утворених іонами кисню. Як зазначалося вище, відпал при кімнатній температурі приводить до зміщення T^* в область низьких температур, яке також супроводжується значними змінами форми резистивних переходів у надпровідний стан. Дійсно, як видно із рис. 7, на якому показані ці ж переходи в координатах $d\rho/dT - T$, спостерігається кілька чітко виражених піків. Згідно з [33], максимумами на цих залежностях відповідають T_c різних фаз-кластерів. Таким чином, у наших експериментальних зразках є від двох до чотирьох таких фаз, які ймовірно відрізняються один від одного вмістом кисню, і, відповідно, мають різні критичні температури переходу в надпровідний стан.

Характерною особливістю впливу відпаду кристалів при кімнатній температурі є значна зміна висоти сходинок, а також велике, до $\Delta T_c \approx 10$ K, зміщення піків на залежностях $d\rho(T)/dT$ вгору за температурою, яке спостерігається для кожної з фаз-кластерів і вказує на зміну шляхів протікання струму. Це, в свою чергу, можливо при зміні просторового розподілу і розмірів кластерів низько- і високотемпературної фаз. Останнє вимагає дифузійного переміщення кисню на відстань порядку розмірів кластерів.

Відомо [20], що при зміні вмісту кисню в базисній площині сполук $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ можливе виникнення ряду впорядкованих станів. Їх основною особливістю є мультиплікування комірки вздовж періоду b .

Стехіометричним концентраціям кисню і вакансій можуть відповідати однофазні надструктури. Для проміжних складів можливе або розупорядкування в системі кисень-вакансії, або виникнення суміші впорядкованих фаз або багатокластерних структур, які характеризуються відсутністю чітких меж між областями кристала з різним вмістом кисню і типом упорядкування.

Теоретично можливість упорядкування кисневих вакансій в базисній площині була передбачена в роботі [41]. У цій роботі розрахунки проводились в рамках одновимірної моделі Ізінга, а також було проведено моделювання методом Монте-Карло.

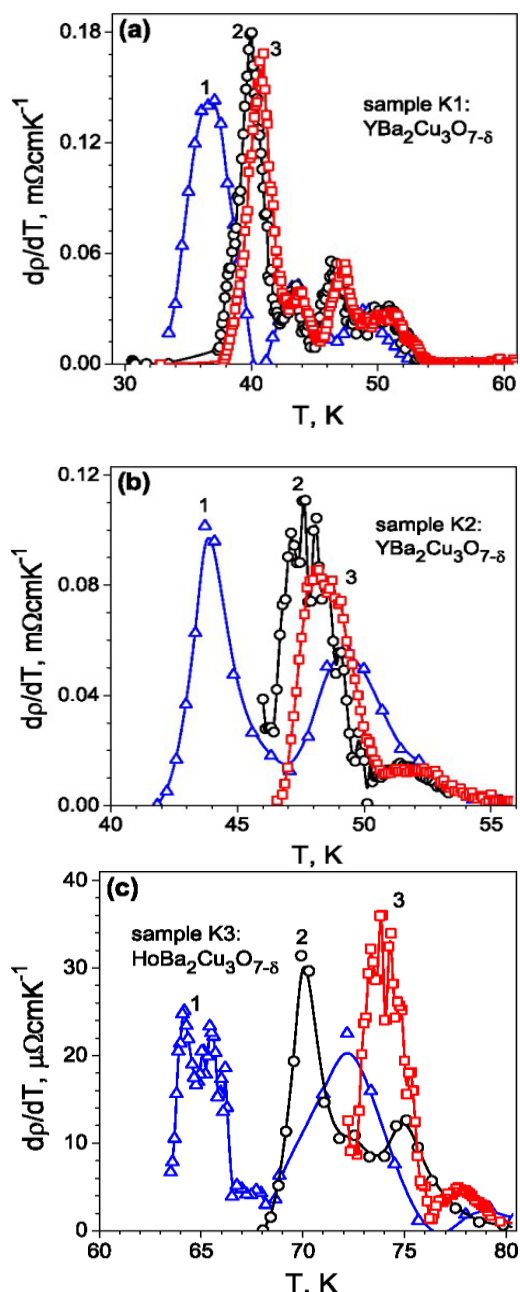


Рис. 7. Резистивні переходи в надпровідний стан в координатах $dp/dT - T$ монокристалів $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (a,b) та $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (c). Позначення кривих відповідають позначенням на рис. 4.

Fig. 7. Resistive transitions to the superconducting state in $dpab/dT-T$ coordinates of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (a,b) and $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (c) single crystals. The designations of the curves correspond to the designations in Fig. 4

Наступні експериментальні дослідження підтвердили висновки, зроблені в цій роботі. Так, наприклад, можливість атомного впорядкування була вивчена в [42] на підставі дослідження ряду фізичних властивостей керамічних зразків $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$.

При цьому було показано, що в результаті нагрівання таких зразків при температурах в інтервалі

473–723 K, а також їх ізотермічної витримки та охолодження змінюється співвідношення між концентраціями кисню і вакансій у площині C (1)-O (1) і утворюються впорядковані стани при $7-\delta = 6.83, 6.8, 6.75$ і 6.67 . Впорядкування чітко проявляється на залежностях об'єму надпровідної фази і провідності при кімнатній температурі. Кореляція між цими двома характеристиками дозволила авторам обґрунтувати уявлення про надпровідний кластер, структура якого близька до впорядкованої, а концентрація носіїв заряду – до значення, що відповідає заповненню цілого числа зон.

Спостережуване в цій роботі зменшення електроопору в процесі відпалу також свідчить про впорядкування в системі кисень-вакансії. Тому слід очікувати, принаймні, при кімнатних температурах, впорядкованого стану в системі кисень-вакансії. Спостережувана ж у цій роботі ступінчаста форма резистивних переходів, ймовірно, свідчить про нестехіометричні співвідношення концентрацій кисню і вакансій, що призводить до утворення суміші різних кластерів. Ці кластери можуть являти собою окремі фази, які, мабуть, характеризуються різним вмістом кисню і його упорядкуванням, і, відповідно, мають різні критичні температури. Наявність сходинок також передбачає відсутність перколяційних шляхів протікання струму по фазі з більшою критичною температурою. В іншому випадку ця фаза шунтувала б низькотемпературну фазу і спостерігався б перехід у надпровідний стан тільки високотемпературної фази.

2.5. Фазове розшарування та енергія активації процесу релаксації критичної температури

Як видно із рис. 4 і рис. 6, характерною особливістю впливу відпалу є значна зміна висоти сходинок, а також істотне, до $\Delta T_c \approx 10$ K, зміщення піків на залежностях $dp(T)/dT$ вгору за температурою (рис. 6), яке спостерігається практично для кожної з фаз зразків K1–K3. Згідно з [1, 43], величина критичної температури у сполуці $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ пов'язана з числом дірок у площині CuO_2 за допомогою універсальної параболічної залежності:

$$T_c = T_c^{max} [1 - 82.6(n - n_{opt})^2] \quad (3)$$

де T_c^{max} – максимальна критична температура, а $n_{opt} = 0.25$ – оптимальний вміст числа дірок на площину для цієї сполуки. Розрахунки, проведені з урахуванням цього співвідношення, показують, що зі збільшенням часу відпалу у процесі витримки при кімнатній температурі число носіїв для низько- і високотемпературних фаз в обох зразках збільшується приблизно на 3–5%. Така зміна концентрації носіїв, а також зміна висоти сходинок на резистивних переходах вказує на зміну шляхів протікання струму

після відпалу кристалів при кімнатній температурі, що можливо при зміні просторового розподілу і розмірів кластерів низько- і високотемпературної фаз. Останнє вимагає дифузійного переміщення кисню на відстань порядку розмірів кластерів.

На рис. 8 представлені результати вимірювань часових залежностей релаксації критичної температури для різних фаз у процесі поетапного відпалу зразків при кімнатній температурі $T_c(t_a)$, де t_a – час відпалу.

Суцільними лініями показані результати розрахунків за формулою:

$$T_c(t) = T_c(\infty) + [T_c(0) - T_c(\infty)] \exp[-(t/\tau)^{1/2}], \quad (4)$$

де $T_c(\infty)$ і $T_c(0)$ – рівноважне і початкове значення критичної температури; відповідно; τ – характерний час релаксаційного процесу. Розрахунки, проведені згідно з (5), показали, що отримання рівноважного значення $T_c(\infty)$ у процесі поетапного відпалу досягається протягом 8–10 годин для фаз із різною T_c . Використовуючи значення τ , отримані згідно з (5) з наших експериментальних даних, ми можемо визначити енергію активації релаксаційного процесу в наших зразках за допомогою закону Арреніуса:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E_A}{k_B T}\right), \quad (5)$$

де $\tau_0 = 1.4 \times 10^{-12}$ с – характерний період [7] для цих ВТНП-сполук. Отримані з наших даних значення $E_A \approx 0.94$ eV для зразка $Ho_4Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ виявилися трохи нижче характерних значень $E_A \approx 0.98$ eV, отриманих для сполук $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з пониженим вмістом кисню. Тут також необхідно відзначити, що всі характерні зміни форми температурних залежностей електроопору та абсолютних значень резистивних параметрів, які спостерігалися у процесі ізобаричного відпалу зразків при кімнатних температурах у разі сполук $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ носили набагато більш яскраво виражений характер у порівнянні із зразками $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Як зазначалось раніше, це може бути обумовлено зміною характеру перерозподілу вакансійної кисневої підсистеми при заміні ітрію на гольмій, що має більший іонний радіус [14].

2.6. Асиметрія процесів релаксації та часові константи різних видів упорядкування кисню

Слід також зазначити, що, як показали проведені розрахунки, досягнення рівноважного значення $T_c(\infty)$ у процесі поетапного відпалу досягається значно швидше для низькотемпературних фаз у порівнянні з високотемпературними фазами: $\tau(T_{c1})/\tau(T_{c2}) \approx 1.23$ для зразка $HoBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ і $\tau(T_{c1})/\tau(T_{c2}) \approx 2.23$ для зразка $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Мабуть, це явище може бути пов'язане з

різницею дифузійного шляху індукованого відпалом процесу утворення кластерів різного розміру для фаз з різними T_c .

Дійсно, як зазначалося раніше, у недавній теоретичній роботі [24] було показано, що критична температура в $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ однозначним чином пов'язана з розмірами надпровідних кластерів, утворених іонами кисню, що формують негативні U-центри, відповідальні за генерацію носіїв [24] у сполучі. Наприклад, великим розмірам таких кластерів відповідають більш високі значення T_c і навпаки. До такого ж висновку приводять і оцінки, виконані в рамках домішкового механізму високотемпературної надпровідності в теоретичній роботі [25]. У цьому випадку, при формуванні кластерів більшого розміру атоми лабільного кисню повинні долати великі відстані для того, щоб знайти вакантне місце в позиціях Cu-O.

При цьому слід зазначити, що у випадку найбільш високотемпературної фази зразка $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ залежність $T_{c3}(t)$ не вдалося задовільно описати співвідношенням виду (5).

Водночас, експериментальні дані знайшли добру згоду з розрахунковою кривою (суцільна лінія на верхній кривій (порожні кільця) на рис. 7а), отриманою при використанні двоєкспоненційного закону виду:

$$T_c(t, a, \tau_1, \tau_2) = T_c(\infty) - [T_c(\infty) - T_c(0)] \cdot \{a \exp(-t/\tau_1)^{0.5} + (1 - a) \exp(-t/\tau_2)^{0.5}\} \quad (6)$$

При цьому вважається, що процес перерозподілу кисню можна умовно розділити на основний швидкоплинний процес з тимчасовою константою τ_1 , відповідальний за впорядкування кисню в межах фрагментів Cu-O ланцюжків, і більш повільний процес з характерним часом τ_2 , що визначає виникнення двовимірної впорядкованої структури.

Тут a – ваговий коефіцієнт двох релаксаційних процесів; $T_c(0)$ і $T_c(\infty)$ – температури надпровідних переходів до і після релаксації відповідно. Отримані з розрахунку за цією формулою значення $\tau_1 \approx 50$ –90 хв і $\tau_2 \approx (2$ –4) $\times 10^3$ хв задовільно узгоджуються з даними робіт [5, 7]. Це ще раз підтверджує висловлене раніше припущення про те, що відпал при кімнатних температурах призводить до дифузійного переміщення лабільної компоненти на відстань порядку розмірів кластерів.

Кривою 3 на рис. 8 (с) показано результати вимірювань часових залежностей релаксації $T^*(t)$. Суцільні лінії є результатами апроксимації експериментальних даних за допомогою співвідношення, аналогічного (5). Видно, що спостерігається явна кореляція в поведінці залежностей $T^*(t)$ і $T_{c1}(t)$, $T_{c2}(t)$, що також може

служити додатковим непрямым підтвердженням взаємозв'язку структурних і електротранспортних аномалій в системі.

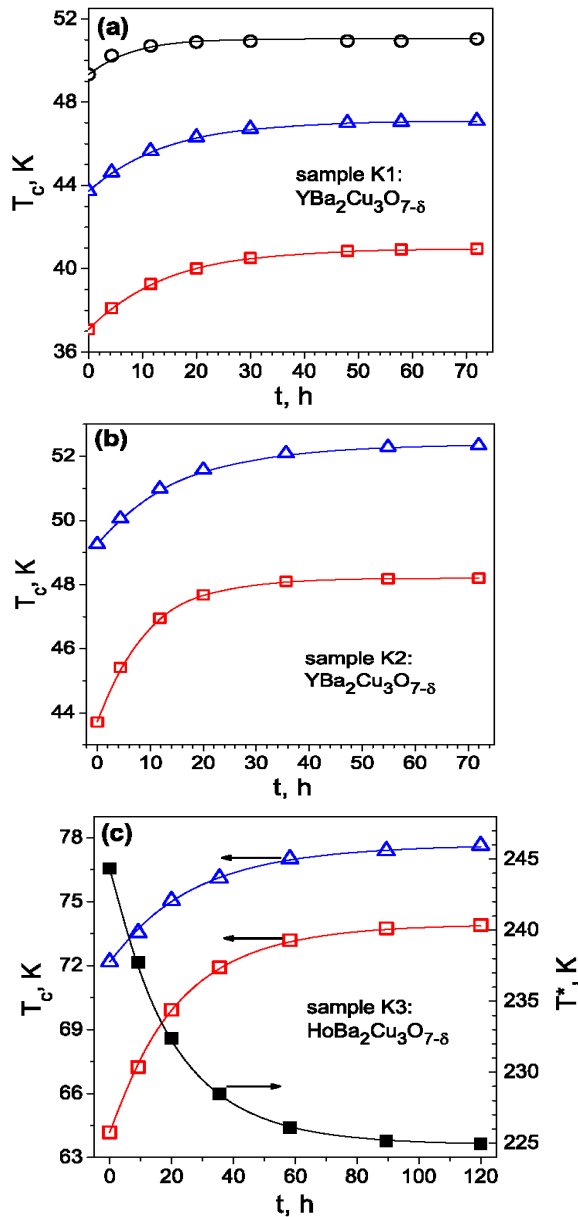


Рис. 8. Часові залежності релаксації критичної температури монокристалів $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (a, b) і $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (c) для різних фаз ($T_{c1}(t)$ – квадрати, $T_{c2}(t)$ – трикутники, $T_{c3}(t)$ – кільця) і температури відкриття псевдощілини $T^*(t)$ (темні квадрати) у процесі поетапного відпалу зразків при кімнатній температурі. Суцільними лініями показано результати розрахунків за формулами.

Fig. 8. Time dependences of relaxation of the critical temperature of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (a, b) – and $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (c) single crystals for different phases ($T_{c1}(t)$ – squares and $T_{c2}(t)$ – triangles and $T_{c3}(t)$ – circles) and opening temperatures pseudoslits ($T^*(t)$ – dark squares) in the process of stepwise annealing of samples at room

temperature. Solid lines show the results of calculations using formulas.

3. Атомістичне моделювання дифузії Li^+ в Y_2O_3 і супутніх оксидах

Як відомо, унікальна комбінація механічних, фізичних і хімічних властивостей рідкісноземельних оксидів (РЗО) зумовила їх широке застосування в різних галузях сучасної науки і техніки. Так, наприклад, РЗО-добавки істотно поліпшують емісійні властивості молібденових катодів і підвищують критичні параметри нових матеріалів на основі талію. На сьогодні РЗО-сполуки також інтенсивно досліджуються як перспективні сцинтиляційні і оптичні матеріали. Все вище сказане свідчить про актуальність дослідження електрофізичних та структурних характеристик різних типів РЗО-сполук. Основні експериментальні дослідження структури РЗ оксидів із сімейства лантановидів були проведені для трьох поліморфних форм: гексагональної А-типу (просторова група $P\bar{3}m1$), моноклінної В-типу (просторова група $C2/m$) і кубічної С-типу (просторова група $Ia3$). Теоретичні функціональні розрахунки щільності були також застосовані для визначення параметрів ґратки ряду РЗ оксидів [44]. Спочатку гексагональні РЗ оксиди А-типу були вивчені в [45] Заچارайзеном, а просторова група $P\bar{3}m1$ була детально досліджена Паулінгом [46]. Моноклінна форма В-типу була вивчена Крамером [47] як проміжна між низькотемпературною кубічною і високотемпературною гексагональною фазами.

Метою нашої роботи є систематичне моделювання низки кристалічних параметрів цих матеріалів за допомогою набору, так званих, «переносних» міжатомних потенціалів і порівняння отриманих структур з наявними в літературі експериментальними [48–50] і теоретичними [44] даними. Виявилося, що методика атомного моделювання дає добрі результати для раніше вивчених РЗ-оксидів [51, 52], а також ряду феромагнітних матеріалів та інших систем (наприклад, гідроксидів [53]). Міграція іонів літію Li^+ в оксиді ітрію (Y_2O_3) розглядається для ілюстрації застосовності таких моделей для вирішення проблем технологічного характеру.

3.1. Методика моделювання

У вибраній методиці використано пакет атомного моделювання GULP [54]. Методика моделювання (ММ) заснована на описі ґратки в термінах ефективних потенціалів. Кулонівські сили підсумовуються методом Евальда [55], а короткодійчі сили моделюються за допомогою параметризованих парних потенціалів (див. нижче). Моделювання ґратки проводиться за допомогою мінімізації її загальної

енергії з урахуванням значень векторів елементарної комірки і положень іонів в межах елементарної комірки. Дослідження засноване на класичній моделі опису решітки – моделі Борна. Короткодійючі енергетичні члени $S(r_{ij})$ апроксимовані параметризованим парним параметром Букінгема:

$$S(r_{ij}) = A_{ij} \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6}, \quad (7)$$

де r_{ij} – відстань між іонами i і j , A_{ij} , ρ_{ij} і C_{ij} – потенційні параметри, характерні для іонів i і j . Параметри, які використовуються в цій роботі, підігнані емпірично до експериментальних параметрів ґратки та атомним положенням для ряду оксидних сполук. Основою методики атомістичного моделювання є параметризовані короткодійючі потенціали, отримані за допомогою процедури багатоструктурної підгонки, описаної в [51, 52]. Іони кисню розглядаються в поляризаційному наближенні оболонкової моделі Діка – Оверзаузера [56]. При цьому передбачається, що іони O^{2-} володіють оболонкою із зарядом $-2.04 |e|$, зарядом ядра – $0.04 |e|$ і силовою константою 6.3 eV .

Моделювання зіставне з точними розрахунками структури ґратки, загальна енергія якої мінімізована з урахуванням її параметрів і положень іонів в елементарній комірці. Для моделювання впливу структурних дефектів, ґратку послідовно поділяли на концентричні сферичні області відповідно до процедури Мотта – Літлтона [57] з урахуванням деформації ґратки навколо дефектів і вимоги мінімізації енергії. При цьому важливо вибирати області досить великих розмірів, що дозволяють мінімізувати вплив енергії дефектоутворення в загальній процедурі розрахунків. Згідно з [57] радіуси областей I-го і II-го рівнів повинні складати $10 \text{ \AA}$ і $31 \text{ \AA}$ відповідно.

3.2. Розрахунок міграційної ентальпії

Код статичного атомістичного моделювання застосовувався для передбачення дефектної ентальпії на проміжних міграційних процесах. У Y_2O_3 активаційні міграційні механізми складаються з послідовних стрибків мігруючих іонів між міжвузлями Y_2O_3 , що володіють кубічної структурою С-типу, характерною для РЗ оксидів (так звана *bixbyite* структура, просторова група $Ia\bar{3}$) з параметром ґратки $10.604 \text{ \AA}$. Така структура допускає наявність міжвузлових іонів в трьох позиціях: $8b$, $16c$ ($x = 1/8$) і $24d$ ($x = -1/4$). Ентальпія активації при міграції є різницею між ентальпією системи у випадку, коли мігруючий іон знаходиться в осілому положенні і його рівноважної ентальпією. Ентальпія іона в осілому положенні розраховується за допомогою введення

фіксованого іона літію в оточення осілого положення з подальшою деформацією оточуючої його ґратки. Оцінку потенційної енергії для поверхонь – паралельної і перпендикулярної напрямку дифузії – необхідно проводити для визначення конфігурації дифузійного шляху.

3.3. Властивості базисної ґратки

Початковим кроком при моделюванні впливу структурних дефектів є моделювання основних структурних параметрів (табл. 1) та їх порівняння з відповідними експериментальними даними [48–50] (табл. 2).

Таблиця 1

Дані атомічного комп'ютерного моделювання для об'єму, параметрів ґратки та характеристичних кутів РЗ оксидів В-типу.

Table 1

Atomic computer modeling data for the volume, lattice parameters, and characteristic angles of B-type RE oxides

	Sm_2O_3	Eu_2O_3	Tb_2O_3
$V(\text{\AA}^3)$	151.520	149.066	143.557
$a(\text{\AA})$	14.383	14.311	14.143
$b(\text{\AA})$	3.613	3.593	3.547
$c(\text{\AA})$	8.898	8.848	8.737
$B(^{\circ})$	100.587	100.647	100.720

При цьому результати атомного масштабного моделювання для РЗ оксидів А-типу за своїми абсолютними значеннями виявилися значно ближче до експериментальних результатів, ніж вихідні дані, отримані в теоретичних розрахунках, за винятком сполуки La_2O_3 , з точністю оцінки 1.4% .

Також було проведено порівняння об'ємної енергії, що припадає на молекулу (одиницю стехіометричної формули) РЗ оксидів для А- і С- типів - рис. 8 і рис. 9.

Енергія, мінімізована за об'ємом оксидів Sm_2O_3 , Eu_2O_3 і Tb_2O_3 моноклінної структури В-типу, була оцінена з точністю не менше ніж 1.4% .

Для РЗ оксидів С-типу спостерігається повна згода результатів нашого дослідження з даними ТФГ і експериментальними даними. Як випливає з рис. 10 і табл. 2, потенційна модель в точності відтворює кристалічну структуру поліморф В- і С-типів, що вказує на достовірність моделі. Для деяких оксидів С-типу метод теорії функціонала густини (ТФГ), розроблений Хіросакі та ін. [44], не підходить через відсутність відповідних псевдопотенціалів.

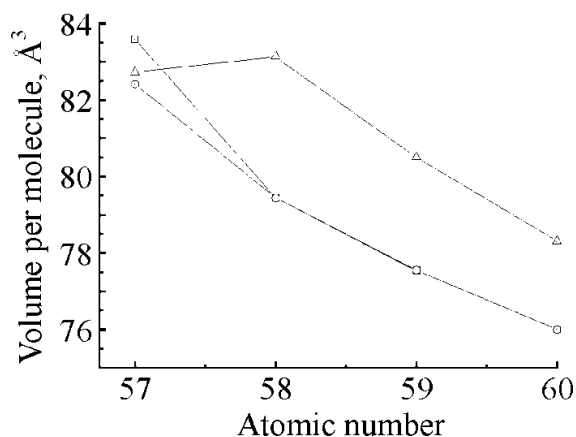


Рис. 9. Об'єм, який припадає на молекулу, як функція атомного номера для РЗ оксидів А-типу, розрахований із атомних масштабних моделей.

Fig. 9. The volume per molecule as a function of the atomic number for PZ of C-type oxides, calculated from atomic scale models.

Таблиця 2

Експериментальні дані для об'єму, параметрів ґратки та характеристичних кутів РЗ оксидів В-типу.

Table 2

Experimental data for the volume, lattice parameters, and characteristic angles of B-type RE oxides.

	Sm ₂ O ₃	Eu ₂ O ₃	Tb ₂ O ₃
V(Å ³)	149.722	146.945	141.917
a(Å)	14.198	14.110	14.030
b(Å)	3.627	3.602	3.536
c(Å)	8.856	8.808	8.717
B(°)	99.986	100.037	100.100

Методика мінімізації енергії може заповнити цю прогалину при наявності структурних даних, порівнянних з експериментальними результатами. Очевидно (з отриманих результатів), що енергія однієї молекули РЗ оксидів зменшується зі збільшенням атомного номера незалежно від їх кристалічної структури. Це пояснюється зменшенням РЗ іонного радіуса з урахуванням збільшення атомного номера («стиснення» лантаноїдів [59]).

3.4. Міграція Li⁺ в Y₂O₃

Міжвузельні іони в bixbyite структурах формуються двома способами. Вважається, що шлях від 8b до 16c енергетично більш вигідний, ніж від 16c до 24d – шлях для міграції іонів літію в Y₂O₃.

Щоб упевнитися в тому, що іони літію рухаються

по прямій лінії від 8b до 16c, був побудований контурний графік, що представляє собою площину, що проходить через точку осіlosti, перпендикулярну міграційному вектору (рис. 11).

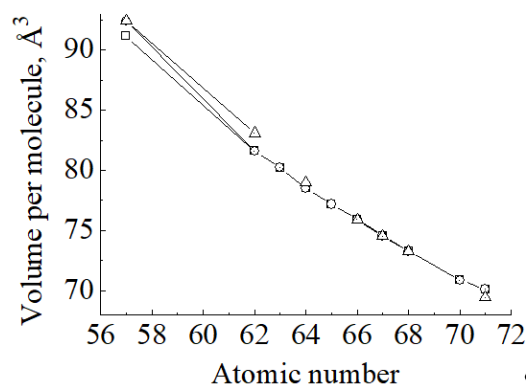
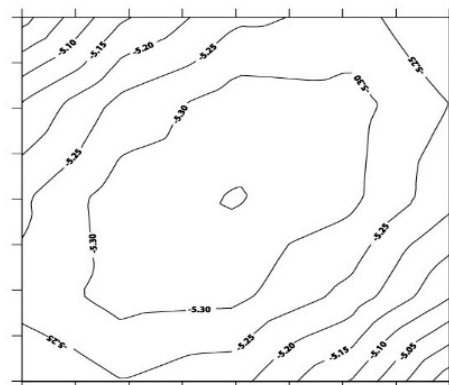


Рис. 10. Об'єм, який припадає на молекулу, як функція атомного номера для РЗ оксидів С-типу, розрахований із атомних масштабних моделей.

Fig. 10. The volume per molecule as a function of the atomic number for PZ of C-type oxides, calculated from atomic scale models. Experimental and theoretical data are also presented.



найнижчої ентальпії розташована на середині графіка, що вказує на те, що іон літію рухається по прямій від міжвузельного розташування 8b до 16c.

На рис. 12 показано контурний графік міграції міжвузельного Li^+ в Y_2O_3 , паралельний міграційному вектору, який містить набір міжвузельних місць 16c-8b-16c. На цьому графіку Li^+ знаходиться на еквідистантних позиціях 16c-8b-16c сітки 21×21 , які розташовувалися по діагоналі графіка.

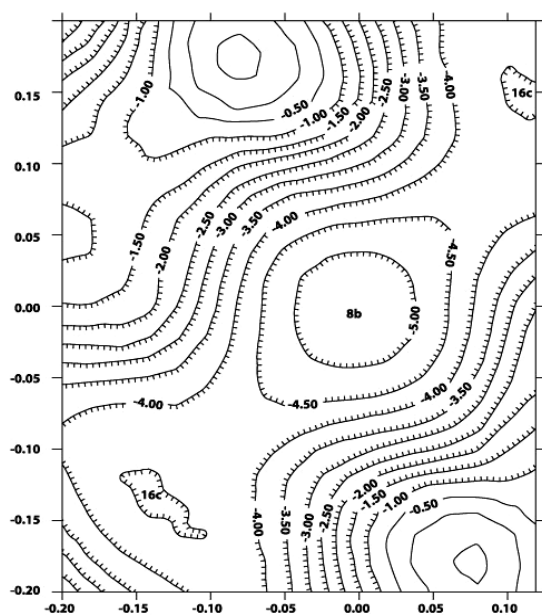


Рис. 12. Контурний графік енергетичних поверхонь для площини, паралельної міграційному вектору, який містить міжвузельні позиції 16c-8b-16c в Y_2O_3 . Графік отримано за допомогою поміщення міжвузельних іонів літію в 441 точку контурної сітки. Інтервал між контурами 0.5 еВ.

Fig. 12. Contour plot of the energy surfaces for the plane parallel to the migration vector, which contains the internodal positions 16c-8b-16c in Y_2O_3 . The graph was obtained by placing internodal lithium ions in 441 points of the contour grid. The interval between contours is 0.5 eV.

VI координата іона Li^+ мала іонний радіус 0.76 Å, тоді як Y^{3+} мав іонний радіус 0.9 Å [60]. Точки найнижчої ентальпії були міжвузельні, а шлях цих точок – пряма лінія, що з'єднує міжвузельні позиції 16c-8b-16c. В цілому, використовуючи дану іонну модель і розрахунки, що збігаються з граничними, можна оцінити відповідну ентальпію дефектів. Однак, більш реально оцінювати взаємну (відносну) ентальпію.

ВИСНОВКИ

Таким чином, наведена вище сукупність експериментальних результатів, отриманих у цій

роботі, дозволяє зробити висновок про те, що зменшення вмісту кисню в надпровіднику $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ призводить до фазового розшарування в об'ємі експериментального зразка, яке супроводжується утворенням надструктур або кластерів з упорядкованим розподілом кисневих вакансій і які розрізняються їх концентрацією. Оцінені характерні розміри кластерів, які добре узгоджуються з теоретичними розрахунками, проведеними в рамках кластерної моделі формування ПЩ-аномалії у ВТНП. Виникнення та впорядкування кисневих вакансій в площинах $Cu(1)-O(1)$, очевидно, визначається складною комбінацією кінетичних і термодинамічних факторів. Релаксація електроопору при кімнатних температурах викликана упорядкуванням в кисневій підсистемі в площинах $Cu-O$ і здійснюється термоактиваційним чином. Енергія активації самодифузії кисню, залежно від природи рідкоземельного іона, може змінюватися в межах 0.93–0.98 еВ і є функцією стану зразка. Заміна ітрію на гольмій істотно впливає на розподіл заряду і ефективну взаємодію в CuO -площинах, тим самим, стимулюючи розупорядкування в кисневій підсистемі. У міру досягнення рівноважного стану енергія активації збільшується. Рівноважний стан електроопору є функцією температури. При цьому характерні часи релаксаційних процесів для фаз з різним вмістом кисню збільшуються в міру зростання його концентрації.

Атомне масштабне моделювання адекватно відтворює структурні характеристики 17 РЗ-оксидів. Отримані значення короткодіючих міжатомних потенціалів також можуть бути використані для систематичного дослідження комплексної поведінки та хімії дефектів у цих матеріалах на атомному рівні. Використання техніки моделювання взаємодії кристалічної ґратки, так званої «atomic scale techniques», дозволяє не тільки успішно визначати емпіричні шляхи поліпшення фізико-технічних параметрів різних РЗО-сполук, але і перевіряти адекватність численних теоретичних досліджень, що проводяться на сьогодні. Підтвердженням успішності запропонованої методики є ця робота, в якій було отримано добру згоду розрахункових та експериментальних залежностей структурних параметрів, а також спрогнозована еволюція контуру енергетичного потенціалу РЗО-сполук у процесі міграції літію.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори повідомляють про відсутність конфлікту інтересів.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. B. P. Stojkovic, D. Pines. Phys. Rev. B, 55, 13, 8567 (1997). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.8576>
2. В. Н. Зверев, Д. В. Шовкун. Письма в ЖЭТФ, 72, 2, 103 (2000).
3. I. A. Chaban. Physics of the Solid State, 50, 803 (2008).
4. А. А. Мамалуй, Л. С. Палатник, К. В. Беднов, М. А. Оболенський, А. В. Бондаренко. ФНТ, 19, 11, 1180 (1993).
5. М. А. Obolenskii, R. V. Vovk, A. V. Bondarenko, N. N. Chebotaev. Low Temp. Phys., 32, 571 (2006). <http://dx.doi.org/10.1063/1.2215373>
6. K. Mitsen, O. Ivanenko. J. Exp. Theor. Phys., 100, 1082 (2005). <https://doi.org/10.1134/1.1995792>
7. I. A. Chaban. Phys. Solid State Phys., 5, 769 (2008). <https://doi.org/10.1134/S1063783408050016>
8. A. A. Abrikosov. Phys. Rev. B, 74, 180505 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.097004>
9. Y. Kohsaka, K. Iwaya, S. Satow, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi. Phys. Rev. Lett., 93, 097004 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.097004>
10. R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, A. A. Zavgorodnii, A. V. Bondarenko, I. L. Gulatis, N. N. Chebotaev. Low Temp. Phys., 33, 710 (2007) <https://doi.org/10.1063/1.2746848>.
11. D. M. Ginsber (ed). Physical Properties of High Temperature Superconductors., World Scientific, Singapore (1990), 712 p. <https://doi.org/10.1142/1023>
12. T. Krekels, H. Zou, G. V. Tendeloo, D. Wagener, M. Buchgeister, S. Hosseini, Herzog. Physica C, 196, 363 (1992).
13. R. Vovk, N. Vovk, A. Samoilov, I. Goulatis, A. Chronos. Solid State Commun., 170, 6 (2013).
14. В. В. Мошалоков, І. Г. Муттїк, Н. А. Самарін, Ю. Д. Третьяков, А. Р. Каул, І. С. Грабой, Ю. Г. Метлін. ФНТ, 14, 988 (1988).
15. R. V. Vovk, Z. F. Nazyrov, M. A. Obolenskii, I. L. Goulatis, A. Chronos, V. M. Pinto Simoes. Philos. Mag., 91, 2291 (2011). <https://doi.org/10.1080/14786435.2011.573705>
16. N. F. Mott. Metal-insulator transitions London, CRC Press (1990), 296 p.
17. Y. A. Izyumov, E. Z. Kurmaev. Phys. Usp., 178, 1307 (2008).
18. D. H. S. Smith, R. V. Vovk, C. D. H. Williams, A. F. G. Wyatt. New J. Phys., 8, 128 (2006). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/8/128>
19. I. N. Adamenko, K. E. Nemchenko, V. I. Tsyganok, A. I. Chervanev. Low Temp. Phys., 20, 498 (1994).
20. R. V. Vovk, C. D. H. Williams, A. F. G. Wyatt. Phys. Rev. B, 69, 144524 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144524>
21. A. J. Matthews, K. V. Kavokin, A. Usher, M. E. Portnoi, M. Zhu, J. D. Gething, M. Elliott, W. G. Herrenden-Harker, K. Phillips, D. A. Ritchie, M. Y. Simmons, C. B. Sorensen, O. P. Hansen, O. A. Mironov, M. Myronov, D. R. Leadley, M. Henini. Phys. Rev. B, 70, 075317 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.075317>
22. P. J. Curran, V. V. Khotkevych, S. J. Bending, A. S. Gibbs, S. L. Lee, A. Mackenzie. Phys. Rev. B, 84, 104507 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.104507>
23. D. De Fontaine, G. Ceder, M. Asta. J. Less Common Met., 108, 164 (1990). [https://doi.org/10.1016/0254-0584\(93\)90189-S](https://doi.org/10.1016/0254-0584(93)90189-S)
24. R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, A. A. Zavgorodnii, A. V. Bondarenko, I. L. Goulatis, and A. Chronos. J. Mater. Sci: Mater in Electron, 18, 811 (2007).
25. J. L. Tallon, C. Bernhard, H. Shaked, R. L. Hitterman, J. D. Jorgensen. Phys. Rev. B, 51, 12911 (1995). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.12911>
26. N. Hirosaki, S. Ogata, C. Kocer. J. Alloys Compd., 351, 31 (2003). [http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388\(02\)01043-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388(02)01043-5)
27. W. H. Zachariasen. Phys. Chem., 123, 134 (1926).
28. L. Pauling. Z. Kristallogr., A 69, 415 (1928).
29. D. T. Cromer. J. Phys. Chem., 61, 753 (1957).
30. H. L. Yakel. Acta Cryst., B 35, 564 (1979).
31. T. Schleid, G. Meyer. Less-Common Met., 149, 73 (1989).
32. E. Hubbert-Paletta, H. Mueller-Buschbaum. Anorg. Allg. Chem., 363, 145 (1968).
33. R. W. Grimes, G. Busker, M. A. McCoy. Ber. Bunsen. Phys. Chem., 98, 740 (1994).
34. S. K. Mishra, S. K. Samdarshi, R. K. Singh. J. Phys. Chem. Solids, 56, 999 (1995).
35. H. Mizoguchi, H. Hosono. J. Am. Ceram. Soc., 87, 1187 (2004).
36. N. Izyumov, E. Kurmaev. Usp. Fiz. Nauk, 176, 1241 (2006).
37. A. A. Bosak, I. P. Zibrov, M. G. Semenov. J. Struct. Chem., 49, 342 (2008).
38. J. P. Attfield, A. J. Williams. Physica B, 404, 2989 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.104409>
39. C. Michel, M. Hervieu, M. M. Borel, A. Grandin, F. Deslandes, J. Provost, B. Raveau. Z. Anorg. Allg. Chem., 540, 15 (1987).
40. A. A. Tsirlin, A. N. Vasiliev, I. Orobchenko, H. Nakamura, M. Taguchi. J. Mater. Chem., 20, 1008 (2010). <https://doi.org/10.1039/B921746F>
41. R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, A. V. Bondarenko, Z. F. Nazyrov, N. N. Chebotaev. Low Temp. Phys., 38, 899 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.4752436>
42. S. Naito, M. Sano, H. Imai, T. Akiyama. Solid State Commun., 2005, 136, 100 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2005.06.003>
43. H. Mizoguchi, R. Shiratsuchi, T. Kimura, T. Tani. Chem. Mater., 14, 1450 (2002). <https://doi.org/10.1021/cm011527u>
44. M. A. Obolenskii, R. V. Vovk, N. N. Chebotaev, I. L. Goulatis. J. Appl. Phys., 110, 073920 (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3646470>
45. K. E. Nemchenko, A. I. Chervanev, D. V. Moiseenko. Mater. Res. Bull., 48, 3503 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2013.06.055>
46. G. J. Snyder, E. S. Toberer. Nat. Mater., 7, 105 (2008). <https://doi.org/10.1038/nmat2090>
47. R. W. Cahn, P. Haasen, E. J. Kramer. Materials science and technology. VCH-Publishers, Weinheim (1991), 405 p.
48. R. D. Shannon., A32, 751 (1976). <https://doi.org/10.1107/S0567739476001551>.
49. J. B. Goodenough. J. Solid State Chem., 5, 144 (1967). [https://doi.org/10.1016/0022-4596\(67\)90062-0](https://doi.org/10.1016/0022-4596(67)90062-0).
50. H. Fjellvag, F. Gronvold. Acta Chem. Scand., 37, 745 (1983).
51. A. I. Gusev, A. A. Rempel, A. V. Kaverin. Solid State Ionics, 101, 285 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(97\)00462-4](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(97)00462-4)
52. T. Minami, T. Miyata, T. Yamamoto. Thin Solid Films, 372, 173 (2000) [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(00\)01094-0](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(00)01094-0) .

53. H. Sawada, T. Osawa, S. Motomura, H. Muta, K. Kurosaki. *J. Alloys Compd.*, 389, 197 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.08.079>
54. J. F. Scott, H. L. Tuller, P. S. Wang. *Mater. Sci. Eng.*, 11, 51 (1973).
55. A. Kato, H. Nagasawa, S. Ikeda. *J. Solid State Chem.*, 80, 123 (1989). [https://doi.org/10.1016/0022-4596\(89\)90168-5](https://doi.org/10.1016/0022-4596(89)90168-5)
56. R. V. Vovk, Z. F. Nazyrov, M. A. Obolenskii, I. L. Goulatis. *Low Temp. Phys.*, 40, 456 (2014). <https://doi.org/10.1063/1.4870852>
57. S. Hayashi, K. Asai, M. Akiyama. *J. Appl. Phys.*, 54, 2240 (1983). <https://doi.org/10.1063/1.332571>
58. M. T. Anderson, K. R. Poeppelmeier. *Chem. Mater.*, 6, 2 (1994). <https://doi.org/10.1021/cm00038a002>
59. Y. Yamazaki, P. H. Hor, C. W. Chu. *Appl. Phys. Lett.*, 52, 1934 (1988). <https://doi.org/10.1063/1.99335>
60. D. M. Ginsberg (ed). *Physical Properties of High Temperature Superconductors I*. World Scientific, Singapore (1989), 526 p.
17. Y. A. Izyumov, E. Z. Kurmaev. *Phys. Usp.*, 178, 1307 (2008).
18. D. H. S. Smith, R. V. Vovk, C. D. H. Williams, A. F. G. Wyatt. *New J. Phys.*, 8, 128 (2006). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/8/8/128>
19. I. N. Adamenko, K. E. Nemchenko, V. I. Tsyganok, A. I. Chervanev. *Low Temp. Phys.*, 20, 498 (1994).
20. R. V. Vovk, C. D. H. Williams, A. F. G. Wyatt. *Phys. Rev. B*, 69, 144524 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144524>
21. A. J. Matthews, K. V. Kavokin, A. Usher, M. E. Portnoi, M. Zhu, J. D. Gething, M. Elliott, W. G. Herrenden-Harker, K. Phillips, D. A. Ritchie, M. Y. Simmons, C. B. Sorensen, O. P. Hansen, O. A. Mironov, M. Myronov, D. R. Leadley, M. Henini. *Phys. Rev. B*, 2004, 70, 075317 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.075317>
22. P. J. Curran, V. V. Khotkevych, S. J. Bending, A. S. Gibbs, S. L. Lee, A. Mackenzie. *Phys. Rev. B*, 84, 104507 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.104507>
23. D. De Fontaine, G. Ceder, M. Asta. *J. Less Common Met.*, 108, 164 (1990). [https://doi.org/10.1016/0254-0584\(93\)90189-S](https://doi.org/10.1016/0254-0584(93)90189-S)
24. R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, A. A. Zavgorodniy, A. V. Bondarenko, I. L. Goulatis, and A. Chroneos. *J. Mater. Sci: Mater in Electron*, 18, 811 (2007).
25. J. L. Tallon, C. Bernhard, H. Shaked, R. L. Hitterman, J. D. Jorgensen. *Phys. Rev. B*, 51, 12911 (1995). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.12911>
26. N. Hirosaki, S. Ogata, C. Kocer. *J. Alloys Compd.*, 351, 31 (2003). [http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388\(02\)01043-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388(02)01043-5)
27. W. H. Zachariasen. *Z. Phys. Chem.*, 123, 134 (1926).
28. L. Pauling. *Z. Kristallogr.*, A 69, 415 (1928).
29. D. T. Cromer. *J. Phys. Chem.*, 61, 753 (1957).
30. H. L. Yakel. *Acta Cryst.*, B 35, 564 (1979).
31. T. Schleid, G. Meyer. *Less-Common Metals*, 149, 73 (1989).
32. E. Hubbert-Paletta, H. Mueller-Buschbaum. *Anorg. Allg. Chem.*, 363, 145 (1968).
33. R. W. Grimes, G. Busker, M. A. McCoy and other. *Ber. Bunsen. Phys. Chem.*, 98, 740 (1994).
34. S. K. Mishra, S. K. Samdarshi, R. K. Singh. *J. Phys. Chem. Solids*, 56, 999 (1995).
35. H. Mizoguchi, H. Hosono. *J. Am. Ceram. Soc.*, 87, 1187 (2004)
36. N. Izyumov, E. Kurmaev. *Usp. Fiz. Nauk*, 176, 1241 (2006).
37. A. A. Bosak, I. P. Zibrov, M. G. Semenov. *J. Struct. Chem.*, 49, 342 (2008).
38. J. P. Attfield, A. J. Williams. *Physica B*, 404, 2989 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.104409>
39. C. Michel, M. Hervieu, M. M. Borel, A. Grandin, F. Deslandes, J. Provost, B. Raveau. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 540, 15 (1987).
40. A. A. Tsirlin, A. N. Vasiliev, I. Orobchenko, H. Nakamura, M. Taguchi. *J. Mater. Chem.*, 20, 1008 (2010). <https://doi.org/10.1039/B921746F>
41. R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, A. V. Bondarenko, Z. F. Nazyrov, N. N. Chebotaev. *Low Temp. Phys.*, 38, 899 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.4752436>
42. S. Naito, M. Sano, H. Imai, T. Akiyama. *Solid State Commun.*, 136, 100 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2005.06.003>
43. H. Mizoguchi, R. Shiratsuchi, T. Kimura, T. Tani. *Chem. Mater.*, 14, 1450 (2002). <https://doi.org/10.1021/cm011527u>

44. M. A. Obolenskii, R. V. Vovk, N. N. Chebotaev, I. L. Goulatis. J. Appl. Phys., 110, 073920 (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3646470>
45. K. E. Nemchenko, A. I. Chervanev, D. V. Moiseenko. Mater. Res. Bull., 48, 3503 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2013.06.055>
46. G. J. Snyder, E. S. Toberer. Nat. Mater., 7, 105 (2008). <https://doi.org/10.1038/nmat2090>
47. R. W. Cahn, P. Haasen, E. J. Kramer. Materials science and technology. VCH-Publishers, Weinheim (1991), 405 p.
48. R. D. Shannon., A32, 751 (1976). <https://doi.org/10.1107/S0567739476001551>.
49. J. B. Goodenough. J. Solid State Chem., 5, 144 (1967) [https://doi.org/10.1016/0022-4596\(67\)90062-0](https://doi.org/10.1016/0022-4596(67)90062-0).
50. H. Fjellvag, F. Gronvold. Acta Chem. Scand., 37, 745 (1983).
51. A. I. Gusev, A. A. Rempel, A. V. Kaverin. Solid State Ionics, 101, 285 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(97\)00462-4](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(97)00462-4)
52. T. Minami, T. Miyata, T. Yamamoto. Thin Solid Films, 372, 173 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(00\)01094-0](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(00)01094-0)
53. H. Sawada, T. Osawa, S. Motomura, H. Muta, K. Kurosaki. J. Alloys Compd., 389, 197 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.08.079>
54. J. F. Scott, H. L. Tuller, P. S. Wang. Mater. Sci. Eng., 11, 51 (1973).
55. A. Kato, H. Nagasawa, S. Ikeda. J. Solid State Chem., 80, 123 (1989). [https://doi.org/10.1016/0022-4596\(89\)90168-5](https://doi.org/10.1016/0022-4596(89)90168-5)
56. R. V. Vovk, Z. F. Nazzyrov, M. A. Obolenskii, I. L. Goulatis. Low Temp. Phys., 40, 456 (2014). <https://doi.org/10.1063/1.4870852>
57. S. Hayashi, K. Asai, M. Akiyama. J. Appl. Phys., 54, 2240 (1983). <https://doi.org/10.1063/1.332571>
58. M. T. Anderson, K. R. Poeppelmeier. Chem. Mater., 6, 2 (1994). <https://doi.org/10.1021/cm00038a002>
59. Y. Yamazaki, P. H. Hor, C. W. Chu. Appl. Phys. Lett., 52, 1934 (1988). <https://doi.org/10.1063/1.99335>
60. D. M. Ginsberg (ed). Physical Properties of High Temperature Superconductors I. World Scientific, Singapore (1989), 526 p..

STRUCTURAL RELAXATION AND DIFFUSION OF THE LABILE COMPONENT IN NON-STOICHIOMETRICAL CUPRATES $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\Delta}$ (Re = Y, HO) AND ASSOCIATED OXIDES (overview)

L. O. Pashchenko, O. L. Chykina, R. V. Vovk

*V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine
E-mail: liubov.pashchenko@karazin.ua*

Received on April 05, 2024. Reviewed on May 21, 2024.
Accepted for publication on May 25, 2024.

The paper investigates the effect of annealing at room temperature on the electrical resistance in the ab-plane $\rho_{ab}(T)$ of $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Re = Y, Ho) single crystals with oxygen deficiency. It was found that the reduction of oxygen content induces phase segregation, accompanied by the diffusion of a labile component and structural relaxation in the sample volume, confirming the critical role of oxygen deficiency in determining the structural and electrophysical properties of these materials.

Annealing at room temperature with varying oxygen deficiencies results in an expansion of the linear range of $\rho_{ab}(T)$ and a narrowing of the temperature region where the pseudogap regime occurs, highlighting the importance of oxygen concentration in forming the electronic structure. Excess conductivity follows an exponential temperature dependence over a broad temperature range, indicating the presence of nonlinear effects. The pseudogap temperature dependence is well described within the BKD-BEK crossover theory, confirming a transition between two modes of material behavior.

Replacing yttrium with holmium (Re = Ho) affects the charge distribution in the CuO planes, leading to disorder in the oxygen subsystem, which alters the electronic structure, manifesting as shifts in temperature regions corresponding to metal-insulator transitions and pseudogap anomaly. Thus, the results demonstrate that controlling the oxygen content and chemical composition of $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ crystals is an effective method for managing their electrophysical properties. The obtained short-range interatomic potential values can also be used for systematic studies of the complex behavior and defect chemistry of these materials at the atomic level. The use of "atomic scale techniques" allows not only for improving the physicochemical parameters of various rare earth oxides (REO) compounds but also for validating the adequacy of numerous current theoretical studies.

Keywords: *$\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals, annealing, structural relaxation, labile oxygen, pseudogap anomaly, metal-dielectric transition, accompanying oxides*

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-02>

UDC 550.385.37, 550.388, 621.372(075.8)

PACS numbers: 05.45.Df, 05.45.Tp, 94.20.Bb

PECULARITIES OF HIRST EXPONENT ESTIMATION FOR NATURAL PHYSICAL PROCESSES

O. V. Lazorenko¹ , A. A. Onishchenko² , I. A. Taranova¹ , M. A. Udovenko¹ 

¹ V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine

² Kharkiv National University of Radioelectronics, 14 Nauka Av., 61166 Kharkiv, Ukraine

E-mail: Oleg.V.Lazorenko@karazin.ua

Received on April 05, 2024. Reviewed on May 11, 2024.

Accepted for publication on May 14, 2024.

In bounds of the non-linear and system paradigms, been formulated by L. F. Chernogor in the last 1980th, all processes in open, non-linear, dynamical systems are very complex, non-linear, ultra-wideband or fractal ones.

According to the fractal paradigm put forward in the early 2000s by V. V. Yanovsky, fractality is one of the fundamental properties of the surrounding world. Therefore, the study of fractal characteristics, in particular, of natural physical processes is actual, interesting and useful.

The fractal dimension based on the Hurst exponent is one of the oldest and most famous ones. Based on the study of model fractal signals, it is demonstrated that the dependence between the estimate of the Hurst fractal dimension, obtained by the normalized range method, and its true value is significantly non-linear. To decrease of influence of the errors arising as a result of this, it is proposed to use the method of the corrective function.

The practical effectiveness of the proposed method is demonstrated on the example of the analysis of experimental results obtained in the middle 1960s by H. E. Hurst, which discovered the presence of a somewhat strange grouping of the values of the Hurst fractal dimension around the value of 1.27 for various natural physical processes. A hypothesis about the possibility of explaining this fact precisely by the nonlinearity of the mentioned dependence for R/S-method was proposed.

Keywords: *nonlinear paradigm, natural physical process, fractal paradigm, fractal analysis, fractal dimension, corrective function, rescaled range analysis method, Hurst exponent.*

In cites: O. V. Lazorenko, A. A. Onishchenko, I. A. Taranova, M. A. Udovenko. Peculiarities of hurst exponent estimation for natural physical processes. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 25–34. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-02>.

INTRODUCTION

It is well known that the term ‘fractal’ (from the Latin ‘fractus’, meaning ‘broken’) has been proposed by great American physicist and mathematician Benoit Mandelbrot in 1975 [1]. After some tens of years accompanied by strong scientific fights between the thousands of supporters and opponents, the fractal ideas had fully won (see, for example, [2 – 12]).

Following so called ‘fractal paradigm’ proposed in 2003 by famous physicist Prof. V. V. Yanovsky (Kharkiv, Ukraine), fractality (as non-linearity earlier) was appeared to be one of the fundamental properties of the world around us [13, 14]. Fractality has already become a new paradigm of modern science. Moreover, in the non-linear and the system paradigms been formulated in 1980s by Prof. L. F. Chernogor (Kharkiv, Ukraine), it has been claimed that in the open, complex, non-linear, dynamical systems, many natural and artificial processes, in particular, inspired by operation of the powerful, non-stationary sources of energy release can be classified as short-time, ultra-wideband, non-linear and fractal ones [15].

To discover, research, describe and explain the fractal properties of natural and artificial processes, it is necessary to apply different methods of mono-fractal and multi-fractal analysis (see, for example, [16]). Namely these methods give an useful and comfort set of different numerical characteristics been able sufficiently fully reflect all main peculiarities of the signals and processes investigated.

A fractal dimension D is appeared to be one of the most important such numerical characteristics (see, for example, [12]). In general, there are a lot of different fractal dimensions, which can be estimated as for mathematical, as for physical (natural) fractal signals and processes (see, for example, [16]). Each of them has own peculiarities for calculation methods and own set of appropriate cases for application. In this paper, we shall deal with only one of such fractal dimensions, namely, the Hurst dimension D_H and with only one method for its calculation, namely, rescaled range (R/S) analysis method called frequently as simply ‘R/S method’.

The purposes of the paper are to investigate the peculiarities of the Hurst dimension estimation with R/S method and to try explaining some seems strange regularities obtained in 1980th by B. Mandelbrot for Hurst dimension D_H (and, of course, for the Hurst exponent H) of many natural physical processes.

R/S METHOD AND HURST FRACTAL DIMENSION

Being as natural, as artificial origin, many real signals and processes in nature have fractal properties and, therefore, are the physical fractals [1 – 9]. It is important,

that in the most cases, these properties are understood namely in statistical sense, not in algebraic or geometric ones [1 – 9]. Therefore, to describe them correctly, the statistical numerical characteristics should be used.

The Hurst exponent H been introduced by H. E. Hurst in 1951 (twenty-four years before fractals!) in the paper [17] is appeared to be such the oldest statistical numerical characteristic. In bounds of the Generalized Brownian Motion (GBM) Model [3], the Hurst exponent H and fractal dimension D_H called as the Hurst fractal dimension are connected with the relation $D_H = 2 - H$.

Today, to estimate the Hurst exponent of a signal $X(t)$, there are many different ways. Being proposed by H. E. Hurst in 1965 [18], the oldest way is well known as the Rescaled Range Method or R/S method [3].

According to the new fractal analysis method classification introduced in 2022 [19], all existing mono-fractal analysis methods can be divided at six different groups, namely, methods based on the geometric characteristics, methods based on the algebraic characteristics, methods based on the statistical characteristics, methods based on the frequency and time-frequency characteristics, complex methods and special methods. Being statistical by the origin, R/S method is appeared to be a member of the group of methods based on the statistical characteristics.

As the examples of another ways of the Hurst exponent estimation, the Variogram [20] or Semivariogram [21] Method, the Mandelbrot and Wallis Method [22], the Dispersion Analysis Method [23] known as the Standard Deviation Analysis [24] too, the Autocorrelation Analysis Method [25], the Second Moment Method [26], the Peltier and Levi-Vehel Method [27], the Variance Plot Method [28], the Detrended Fluctuation Analysis Method [29], the Aggregated Dispersion Method [30], the Aggregated Signal Absolut Values Method [30], the Scaled Windowed Variance Method [31], the Detrended Moving Average Method [32], the Signal Summation Conversion Method [33], the Diffusion Entropy Analysis Method [24], the Variational Dimension Method [34], the Adaptive Fractal Analysis Method [35], the Fractal Dimension Algorithm Method [36], the Generalized Variogram Method [37] and many others can be listed.

As well known, the main idea of the R/S method is following (see, for example, [21]). Note, we shall speak about a discrete signal investigated, since in practice, if the digital signal processing methods are applied, all the signals and the processes researched should be represented in discrete form only.

Let's consider a discrete signal s_i containing N points ($i = \overline{1, N}$, that is the variable i varies in bounds from 1 to N with a unit step). For this signal, its partial sums

$$y(n) = \sum_{i=1}^n s_i, \quad n \geq 1,$$

dispersions (square of the standard deviations $S(n)$)

$$S^2(n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[s_i - \frac{1}{n} y(n) \right]^2, n \geq 1$$

a so called ranges $R(n)$ should be estimated. As well known, the range $R(n)$ of the signal s_i is given by the relation:

$$R(n) = \max_{0 \leq t \leq n} \left(y(t) - \frac{t}{n} y(n) \right) - \min_{0 \leq t \leq n} \left(y(t) - \frac{t}{n} y(n) \right).$$

Basing on these values, so called R/S statistics is build:

$$\frac{R}{S}(n) \equiv \frac{R(n)}{S(n)} = \frac{1}{S(n)} \times \left[\max_{0 \leq t \leq n} \left(y(t) - \frac{t}{n} y(n) \right) - \min_{0 \leq t \leq n} \left(y(t) - \frac{t}{n} y(n) \right) \right], n \geq 1.$$

In 1951 [17], basing on the results of empirical investigations, H. E. Hurst found that the mathematical expectation of such statistics showed a power-law relationship with the size of the observation window length n as:

$$E[R/S(n)] \sim Cn^H,$$

where C is some limited, positive constant, which doesn't depend on n , H is the Hurst exponent, $E[\]$ is the operation of a mathematical expectation calculation.

Therefore, varying the observation window length n , the plot of the logarithms of $E[R/S(n)]$ vs. the logarithm of n can be obtained. If a signal s_i investigated has really the self-affine (and fractal, of course) properties, all points calculated should be appeared to be grouped around some straight line. Being equal to the angle coefficient of this straight line, the Hurst exponent H can be estimated with usage of the least square method.

It is very important to note, that if that points were appeared to be not grouped around any straight line, it can be claimed, that a signal investigated hasn't a self-affine property and, therefore, is not a fractal one. The Hurst exponent H cannot be estimated in such case at all.

On other hand, in most practical cases, a signal investigated is appeared to be fractal in some limited scale range only, not in all range. In such case, the experimental pointes plotted in the double logarithmic coordinates can be successfully approximated with a linear function in some scale range only, not in all range too. Therefore, they should speak about limited scale range fractal properties of the signal or process researched.

Moreover, as it had been found by B. Mandelbrot (see, for example, [1, 3]), for fractals, the Hurst exponent value H should be limited in the range $0 < H < 1$. Otherwise the signal analyzed is appeared to be not self-affine and, therefore, is not fractal [3]. If the condition $0 < H < 1$ was successfully satisfied, then one can believe that the signal investigated has mono-fractal properties in this range. It is quite possible that for the same signal, some different scale

ranges with different Hurst exponent values will be obtained [3].

It is necessary to point, that R/S method can be successfully applied for investigations of the functions as time, as space variables. Fortunately, formal replacing of a time variable by a space one doesn't destroy the R/S method correctness.

Meanwhile, in many cases, the real physical processes, specially being in open, non-linear, dynamical systems [15], are appeared to be non-stationary ones. Moreover, it means that their fractal properties can vary with time too. So, the Hurst exponent H should be estimated for some limited, sliding time window $W(t)$, but not for all signal $X(t)$ at once. In this case, the Hurst exponent becomes a function of the time $H = H(t)$ [38]. In our opinion, it is convenient to connect these Hurst exponent values with corresponding time locations of the center of the sliding time window $W(t)$ used. Namely such approach is applied in this paper.

Let's return to the Hurst fractal dimension D_H calculation with the R/S method application for the entire signal $X(t)$. Namely such approach has been most popular in the middle 1960th, when H. E. Hurst obtained some strange results regarding a set of natural processes and objects. He found (see, for example, [3, 39]) that the Hurst exponent H is more or less symmetrically distributed about a mean of 0.73, with a standard deviation of about 0.09. In this case, the Hurst fractal dimension D_H has a mean of 1.27 and the same standard deviation, $D_H = 1.27 \pm 0.09$. Although this was purely empirical result obtained on the base of generalization of huge amount of experimental data having different natural origin, it looks some strange and surprising. But up to current day, any reasonable theoretical explanations of this strange fact haven't been proposed as by H. E. Hurst and B. Mandelbrot, as by other famous specialists in fractals.

Nevertheless, all the results discussed above have the same peculiarity. They have been obtained with R/S method usage. Therefore, it can be done the following assumption: the strange result obtained could be explained by implying of some hidden peculiarity (or disadvantage) of the R/S method. It is necessary to found it only.

CORRECTIVE FUNCTION METHOD

In 2022 in the paper [40], so called 'Corrective Function Method' for mono-fractal analysis has been proposed. The main idea of this universal method is in following.

Let's consider a mono-fractal analysis method, which allows to obtain an estimation D^* of unknown fractal dimension D of a signal investigated. As it was proposed above, this is a discrete signal s_i containing N points ($i = \overline{1, N}$). The estimation D^* is appeared to be an unknown

non-linear function of D and N , that is $D^* = f(D, N)$. It is understood, that in an ideal case this function must be linear and simple ($D^* = D$) and must not depend on N . But in practice, this situation is appeared to absolutely impossible.

For the sake of justice, we note that in general, the hints of an idea of existence of the non-linear function $D^* = f(D, N)$ for some methods of mono-fractal analysis were be done by some specialists yet before the paper [40] appearance. But there was no its clear formulation and no ways to improve the situation proposed.

The main purpose of the Corrective Function Method is to compensate the existing non-linearity of the function $D^* = f(D, N)$ in some way and, therefore, to increase an accuracy of the fractal dimension D estimation obtained with given method of mono-fractal analysis.

To reach this purpose, in the paper [40], it was proposed to inverse the non-linear function $D^* = f(D, N)$ on the base of so called 'Corrective Function' (CF). For each given mono-fractal analysis method, the CF should be built on the discrete grid over the plain (D, N) with application of the model fractal signal set with known changing values of the variables D and N . The steps of changing on D and N values can be chosen by each researcher in the way which he like. For example, for our practical aims, we have used D value changing in bounds $1 \leq D \leq 2$, with the step 0.01, and N value given by $N = 2^k$, $k \in \mathbb{N}$, where $\mathbb{N}$ is a natural number set. It is clean, that the smaller these steps are, the more precise the fractal dimension D estimation will be. But in the same time, the data volume needed be located in computed rises significantly. Therefore, each researcher should choose between the needed accuracy and the data volume allowed for given calculation.

When the CF on the discrete grid $D_{ij}^* = f(D_i, N_j)$, $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{1, m}$ has been obtained, the process of the non-linear function $D^* = f(D, N)$ inversion can be started. For fixed N value, $N = N_{sig}$, the function $D^* = f(D, N_{sig})$, as a function of one variable on the interval $1 \leq D < 2$, can have an inverse function $D = f^{-1}(D^*, N_{sig})$ only in the case, when the function $D^* = f(D, N_{sig})$ is monotonic there. In this concrete case, the function $D^* = f(D, N_{sig})$ should be a rising function of D in the interval discussed.

For comparatively big values of N_{sig} , there are no problems to satisfy this demand. But when N_{sig} decreases, for a function $D_{ij}^* = f(D_i, N_j)$, the value N_{min} , below of which the monotonicity of the function $D^* = f(D, N_{sig})$ discussed above ($j = \overline{1, (min - 1)}$) is appeared to be disrupted, occurs. As well as all close explanations of this process appearance causes and the bulky relations for the fractal dimension D and its estimation error ΔD are considered in the paper [40], which, if needed, can be

successfully downloaded for free, we avoid to repeat them here.

Nevertheless, we believe (we don't claim, of course) that the algorithm of determination of the N_{sig} value is appeared to be very useful, since it allows to prepare a well-founded and reasonable answer on the question of what exactly is the minimum number of signal points N_{min} and why should be used in this method of monofractal analysis.

To prove the importantness of such answer existence, we can cite an opinion of the world famous fractalist J. Feder, which has claimed in the book [3], that for the R/S method, minimal allowing N_{min} value should be equal at least 2500. May be, this opinion would have some reason, but there was no grounded explanation of such point of view. At the same time, as it was found in the paper [40], for the R/S method, the value N_{min} is appeared to be principally much smaller ($N_{min} = 32$) due to the reasons described above. But it should be taken into account that when N_{sig} value decreases, the error of the Hurst fractal dimension estimation ΔD , of course, rises.

RESULTS OF MODELING WITH STOCHASTIC MONO-FRACTAL SIGNALS USAGE

Let's consider the non-linear function $D^* = f(D, N)$ created for the R/S method on the basis of the model mono-fractal signals.

All these signals used in this paper are the different realization of the one stochastic mono-fractal signal model with varying D and N values. This model is a well-known model based on the modified cosine Weierstrass – Mandelbrot function [41]:

$$MW(t) = \sum_{n=0}^{+\infty} \lambda^{(D-2)n} \cos(\lambda^n t + \varphi_n),$$

where λ is a numerical parameter ($\lambda > 1$), D is a fractal dimension ($1 \leq D \leq 2$), φ_n are the stochastic phases having some chosen distribution law at the interval $[0, 2\pi]$, t is dimensionless time variable. Two examples of such model signal realizations with different fractal dimension D values are shown at the Fig. 1.

It should be pointed that if we consider $\varphi_n = const$ for all existing n , a deterministic mono-fractal signal model with given fractal dimension D appears.

As it was pointed above, in all the investigations regarding a CF building, we used a discrete grid over the plain (D, N) , where D value was changed in bounds $1 \leq D \leq 2$, with the step 0.01, and N value was given by $N = 2^k$, $k \in \mathbb{N}$. Namely this way is used now too.

As well as the model fractal signals used are principally stochastic by their nature, for successful and correct modelling, it is necessary to use many different realizations with the same combinations of D and N with consequent averaging of the results obtained. In this case, the averaging over 300 stochastic realizations was used.

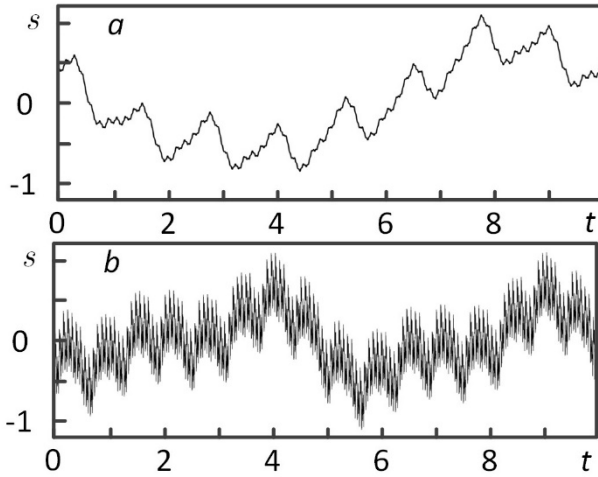


Fig. 1. Model stochastic mono-fractal signals $s(t)$ with different fractal dimension D values: $D = 1.2$ (a) and $D = 1.8$ (b). Here t is a dimensionless time.

At the table 1, the results of the Hurst fractal dimension D^* estimation for the model stochastic fractal signals with given D and N values obtained with R/S method usage are shown. For each combination of D and N , as the Hurst fractal dimension D^* value calculated, as its error ΔD^* estimated are given. In all calculations performed in this paper, the confidence level was used to be equal to 0.9.

From the table 1, the existing non-linearity of the function $D^* = f(D, N)$ with fixed N values is clearly seen. Moreover, there are some interesting tendencies. First, for fixed D , the more N value is, the less difference between D^* and D values occurs. Second, in the worst case, the error

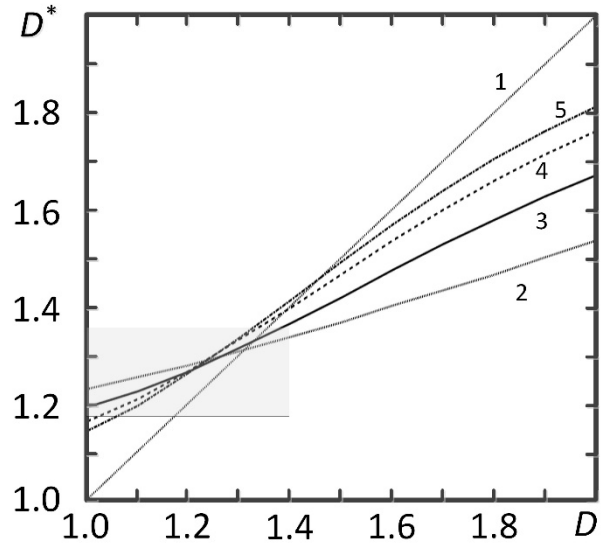


Fig. 2. Comparison of the 'ideal' function $D^* = D$ (1) vs the non-linear function $D^* = f(D, N)$ having fixed N values: $N = 32$ (2), $N = 128$ (3), $N = 512$ (4) and $N = 2048$ (5).

of the D^* value estimation with R/S method usage doesn't exceed approximately 2.5%. Third, for the R/S method, depending on the N value, there is some special bound D_0 value, for which at the interval $1.0 \leq D \leq D_0$ the results of the Hurst fractal dimension D^* estimations turn out to be overestimated, but at the interval $D_0 < D \leq 2.0$ they turn out to be, on the contrary, underestimated. For $N = 32 - 2048$ this D_0 value is found to be slightly increasing in bounds $1.3 < D_0 < 1.4$ with value N rising.

Table 1

Hurst fractal dimension D^* estimation for the model stochastic fractal signals with given D and N values obtained with R/S method usage at the interval $1.00 \leq D \leq 2.00$

N	D										
	1.00	1.10	1.20	1.30	1.40	1.50	1.60	1.70	1.80	1.90	2.00
32	1,23± 0,03	1,25± 0,03	1,28± 0,03	1,31± 0,03	1,34± 0,03	1,37± 0,03	1,40± 0,03	1,43± 0,03	1,46± 0,04	1,50± 0,04	1,53± 0,04
64	1,20± 0,02	1,23± 0,02	1,27± 0,02	1,30± 0,02	1,34± 0,02	1,39± 0,02	1,43± 0,02	1,48± 0,02	1,52± 0,02	1,57± 0,02	1,61± 0,02
128	1,19± 0,01	1,22± 0,02	1,26± 0,02	1,31± 0,02	1,36± 0,02	1,42± 0,02	1,47± 0,01	1,53± 0,01	1,58± 0,01	1,63± 0,01	1,67± 0,01
256	1,18± 0,01	1,22± 0,01	1,26± 0,01	1,32± 0,01	1,38± 0,01	1,44± 0,01	1,50± 0,01	1,56± 0,01	1,62± 0,01	1,67± 0,01	1,72± 0,01
512	1,16± 0,01	1,21± 0,01	1,27± 0,01	1,33± 0,01	1,40± 0,01	1,47± 0,01	1,53± 0,01	1,60± 0,01	1,66± 0,01	1,71± 0,01	1,76± 0,01
1024	1,15± 0,01	1,20± 0,01	1,26± 0,01	1,33± 0,01	1,41± 0,01	1,48± 0,00	1,56± 0,00	1,63± 0,00	1,69± 0,00	1,74± 0,00	1,79± 0,00
2048	1,14± 0,00	1,19± 0,00	1,26± 0,00	1,33± 0,00	1,41± 0,00	1,49± 0,00	1,57± 0,00	1,64± 0,00	1,70± 0,00	1,76± 0,00	1,81± 0,00
4096	1,13± 0,00	1,19± 0,00	1,26± 0,00	1,34± 0,00	1,42± 0,00	1,50± 0,00	1,58± 0,00	1,66± 0,00	1,72± 0,00	1,78± 0,00	1,83± 0,00
8192	1,13± 0,00	1,18± 0,00	1,26± 0,00	1,34± 0,00	1,42± 0,00	1,50± 0,00	1,59± 0,00	1,66± 0,00	1,73± 0,00	1,80± 0,00	1,85± 0,00

Table 2

Hurst fractal dimension D^* estimation and its mean value $\overline{D^*}$ for the model stochastic fractal signals with given D and N values obtained with R/S method usage at the interval $1.00 \leq D \leq 1.40$

N	D					$\overline{D^*}$
	1.00	1.10	1.20	1.30	1.40	
32	1,228±0,028	1,253±0,030	1,277±0,031	1,306±0,032	1,336±0,032	1,280±0,031
64	1,203±0,020	1,234±0,021	1,268±0,021	1,303±0,022	1,344±0,022	1,270±0,021
128	1,190±0,015	1,223±0,015	1,264±0,015	1,313±0,016	1,364±0,016	1,271±0,015
256	1,175±0,011	1,218±0,011	1,264±0,011	1,317±0,011	1,379±0,011	1,271±0,011
512	1,161±0,008	1,207±0,008	1,265±0,008	1,331±0,008	1,396±0,007	1,272±0,008
1024	1,147±0,006	1,200±0,006	1,263±0,006	1,334±0,005	1,410±0,005	1,270±0,006
2048	1,141±0,004	1,194±0,004	1,262±0,004	1,334±0,004	1,412±0,004	1,269±0,004
4096	1,134±0,003	1,191±0,003	1,258±0,003	1,336±0,003	1,418±0,003	1,267±0,003
8192	1,129±0,002	1,184±0,002	1,257±0,002	1,336±0,002	1,418±0,002	1,265±0,002

At the Fig. 2, a comparison of the ‘ideal’ function $D^* = D$ (1) vs the non-linear function $D^* = f(D, N)$ having fixed N values: $N = 32$ (2), $N = 128$ (3), $N = 512$ (4) and $N = 2048$ (5) are shown. The fact of this function non-linearity existence is well confirmed.

A ‘strange’ result obtained by H. E. Hurst and described above is shown at the Fig. 2 as a small gray rectangle corresponding to the upper and the lower bounds of the confidence interval for the fractal dimension D^* . It is necessary to understand how exactly it is placed relatively all the dependencies shown.

Let’s consider closer an interval of fractal dimension D values having such bounds: $1.00 \leq D \leq 1.40$. As it was pointed above, for R/S method, as a rule, at given interval, the overestimating of the Hurst fractal dimension D^* estimation appears. Assume that there is a set of mono-fractal processes with their own true fractal dimension D values uniformly distributed in this interval. As well known, being persistent ($0.5 < H \leq 1$), each of such fractal processes has some long-term dependence (see, for example [1, 3]).

If we would have an ‘ideal’ estimator, then all right values $D^* = D$ would be obtained. But instead of such ‘ideal’ estimator, at our disposal, there is a R/S method only. In this case, we should obtain only the D^* values distorted by the non-linear function $D^* = f(D, N)$. The value of these distortions depends on both the D value and the N value. At least, for $N = 32 - 2048$, the interval $1.00 \leq D \leq 1.40$ is appeared to be non-linearly mapped approximately to the interval $1.15 \leq D \leq 1.40$. In the table 2, the non-linear function $D^* = f(D, N)$ on the interval discussed is given with more accuracy.

Of course, after the mapping performed, the distribution law of such mono-fractal processes is appeared to be differed from the uniform, but seems it is not so significant now. For simplification, let’s suppose that the distribution remains uniform. In such case, for different N values, the mean value of the estimated Hurst fractal

dimension $\overline{D^*}$ on the interval $1.00 \leq D \leq 1.40$ can be simply obtained (table 2).

As for our opinion, these last results are looked to be very surprising. One hand, for an ‘ideal’ estimator, it is understood that $\overline{D^*} = 1.20$. Other hand, for R/S method, this value is appeared to be significantly shifted up. Nevertheless, at least for $N = 32 - 8192$ the ‘strange’ result of H. E. Hurst $D = 1.27 \pm 0.09$ is appeared to be excellently agreed in all cases with $\overline{D^*}$ values obtained with R/S method usage. At the Fig. 3, the relative location of the gray rectangle described above and the non-linear function $D^* = f(D, N)$ with its confidence interval for $N = 32$ (Fig. 3, a) and $N = 128$ (Fig. 3, b) is shown.

DISCUSSION

Taking into account the fact that in middle 1960th, when H. E. Hurst had obtained the results discussed above, there were no effective practical ways to process the signals and the processes with big values of points N , the maximal N value should be limited approximately by 1000. Such assumed value is well agreed with the information contained in [3, 39].

It is necessary to ground why in our investigations, namely the interval $1.00 \leq D \leq 1.40$ is used. It was done not accidentally. It is well known that H. E. Hurst has collected and has investigated the processes having long-term dependences. Today, such processes are well known as persistent ones. They have the Hurst exponent H values changing in the bounds: $0.5 < H \leq 1.0$ and, of course, the corresponding Hurst dimension D_H values satisfy the condition: $1.0 \leq D_H < 1.5$. At the same time, a value $D_H = 1.5$ corresponds to a delta-correlated process which has no time dependence at all. Of course, it should be avoided and be excluded from a consideration. As well as the Hurst fractal dimension error in the results obtained by H. E. Hurst is $\Delta D_H \approx 0.09$, the upper bound in the condition $1.0 \leq D_H < 1.5$ should be decreased approxima-

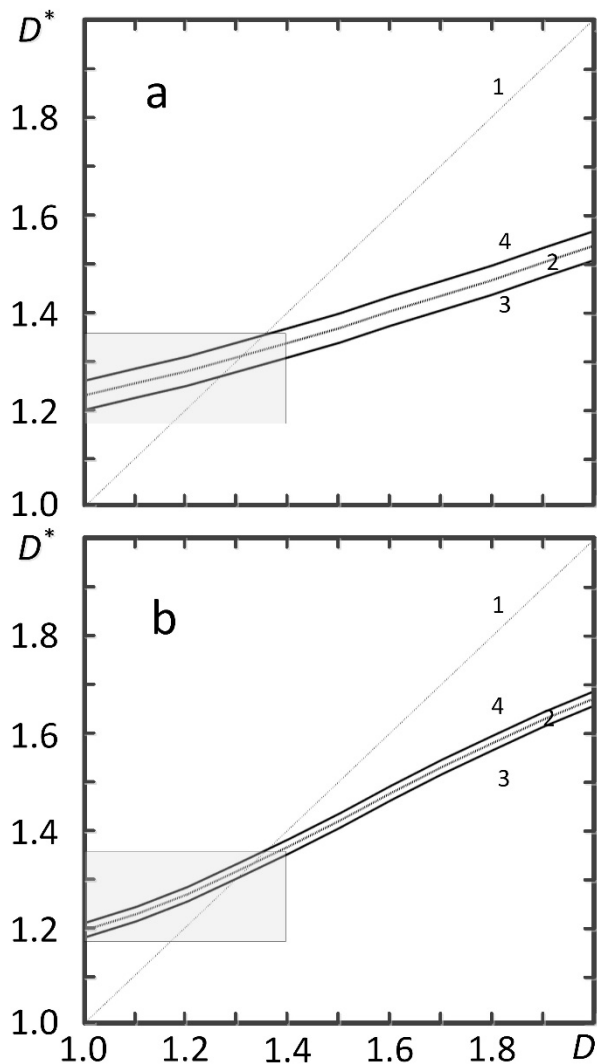


Fig. 3. Comparison of the ideal function $D^* = D$ (1) vs the non-linear function $D^* = f(D, N)$ (2) having fixed $N = 32$ (a) and $N = 128$ (b). The upper (4) and the lower (3) bounds of its confidence interval, a small gray rectangle (the confidence interval bounds) being a graphical view of the ‘strange’ result obtained by H. E. Hurst are shown.

tely at this value. Thus, we obtain the condition $1.00 \leq D \leq 1.40$ used in this work. On this reason, the results of modelling described above are looked to be quietly correct and useful.

Thus, we tried to formulate and to ground a hypothesis, which is able to explain the ‘strange’ results obtained by H. E. Hurst in 1960th yet. On our opinion, an existence of the significant shift for the Hurst fractal dimension D^* estimations observed for persistent natural physical processes can be explained rather by special features of the R/S method applied for processing of the experimental data, than by own really existing properties of these processes.

At the end, it is important to point that this is a hypothesis only. We suppose, but we don’t claim this.

CONCLUSIONS

1. The R/S analysis method is the oldest and the most popular way to estimate a Hurst exponent for any signal or process.

2. In bounds of the Generalized Brownian Motion model, the Hurst fractal dimension D_H and the Hurst exponent H are connected with a simple relation, namely, $D_H = 2 - H$.

3. Grounding on the results of numerical modelling with simultaneous usage of the Corrective Function Method and the set of model stochastic mono-fractal signals based on the modified cosine Weierstrass – Mandelbrot function, for R/S method, it was found that the dependence between a fractal dimension value D^* estimation and a true own fractal dimension value D is appeared to be principally non-linear.

4. The main peculiarities of the R/S method as the oldest and the most popular estimator of Hurst fractal dimension were investigated. The corresponding corrective function was built.

5. A hypothesis, which is able to explain the ‘strange’ results obtained by H. E. Hurst in 1960th yet, was formulated and grounded on the bases of the numerical modelling results.

6. On our opinion, an existence of the significant shift for the Hurst fractal dimension D^* estimations observed for persistent natural physical processes can be explained rather by special features of the R/S method applied for processing of the experimental data, than by own really existing properties of these processes.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. B. B. Mandelbrot. The Fractal Geometry of Nature, San Francisco, CA-Freeman (1982), 460 p. <https://doi.org/10.1119/1.13295>
2. K. J. Falconer. Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications, Chichester, Wiley & Sons (1990), 288 p. <https://doi.org/10.1002/0470013850>
3. J. Feder. Fractals, New York, Plenum Press (1988), 305 p. <https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4899-2124-6>
4. E. Chandrasekhar, V. P. Dimri, V. M. Gadre, editors. Wavelets and Fractals in Earth System Sciences, CRC Press (2014), 294 p. <https://doi.org/10.1201/b16046>
5. D. P. Feldman. Chaos and Fractals. An Elementary Introduction, Oxford, University Press (2012), 408 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199566433.001.0001>
6. B. B. Mandelbrot. Fractals and Chaos: The Mandelbrot Set and Beyond, Springer (2005), 400 p. <https://doi.org/10.1186/1475-925X-4-30>
7. R. M. Crownover. Introduction to Fractals and Chaos, Boston, Jones and Barlett Publishers (1995), 320 p.

- <https://www.amazon.com/Introduction-Fractals-Chaos-Bartlett-Mathematics/dp/0867204648>
8. B. B. Mandelbrot. *Multifractals and 1/f Noise*, Springer (1999), 442 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2150-0>
 9. D. Harte. *Multifractals. Theory and Applications*, Boca Raton, Chapman and Hall/CRC Press (2001), 264 p. <https://doi.org/10.1201/9781420036008>
 10. M. Schroeder. *Fractals, Chaos, Power Laws. Minutes from Infinite Paradise*, New York, W. H. Freeman and Company (1991), 528 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Chaos-Power-Laws-Infinite/dp/0486472043>
 11. F. C. Moon. *Chaotic Vibrations. An Introduction for Applied Scientists and Engineers*, New York, Wiley and Sons (2004), 309 p. <https://doi.org/10.1002/3527602844>
 12. О. В. Лазоренко, Л. Ф. Чорногор. *Радіофізика та Радіоастрономія*, 25 (1), 3 (2020). <https://doi.org/10.15407/rpra25.01.003>
 13. В. В. Яновський. *Universitates*, 3, 32 (2003).
 14. В. В. Яновський. *Лекції з нелінійних явищ. Том 1*, Харків, Видав. Інституту монокристалів (2006), 456 с.
 15. Л. Ф. Чорногор. *Про нелінійність у природі та науці*, Харків, Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна (2008), 528 с.
 16. О. В. Лазоренко, Л. Ф. Чорногор. *Радіофізика та Радіоастрономія*, 28(1), 5 (2023). <https://doi.org/10.15407/rpra28.01.005>
 17. H. E. Hurst. *Trans. Amer. Soc. Civ. Eng.*, 116, 770 (1951).
 18. H. E. Hurst, R. P. Black, Y. M. Simaika. *Long-term storage: an experimental study*, London, Constable (1965), 145 p.
 19. L. F. Chernogor, O. V. Lazorenko, A. A. Onishchenko. *Low Temperature Physics*, 49(4), 459 (2023). <https://doi.org/10.1063/10.0017581>
 20. H. H. Hardy, R. A. Beier. *Fractals in Reservoir Engineering*. Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, World Scientific (1994), 359 p. <https://doi.org/10.1142/2574>
 21. L. Seuront. *Fractals and Multifractals in Ecology and Aquatic Science*, Boca Raton, London, New York, CRC Press (2010), 344 p. <https://doi.org/10.1201/9781420004243>
 22. B. Mandelbrot, J. R. Wallis. *Water Resources Res.*, 5(1) 228 (1969). <https://doi.org/10.1029/WR005I001P00228>
 23. J. B. Bassingthwaighe. *News Physiol. Sci.*, 3, 5 (1988). <https://doi.org/10.1152/physiologyonline.1988.3.1.5>
 24. N. Scafetta, P. Grigolini. *Phys. Rev. E*, 66(3), 036130 (2002). <https://doi.org/10.1103/physreve.66.036130>
 25. J. H. Van Beek, S. A. Roger, J. B. Bassingthwaighe. *Am. J. Physiol.*, 257(5), H1670 (1989). <https://doi.org/10.1152/ajpheart.1989.257.5.h1670>
 26. H. M. Hastings, G. Sugihara. *Fractals: A User's Guide for the Natural Science*, Oxford, Oxford University Press (1993), 248 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Natural-Sciences-Science-Publications/dp/0198545975>
 27. R. F. Peltier, J. Lévy-Véhel. *Research report*, INRIA Rocquencourt (1994). <https://hal.inria.fr/inria-00074279>
 28. J. Beran. *Statistics for Long-Memory Processes*, Chapman and Hall (1994), 328 p. <https://doi.org/10.2307/2983481>
 29. C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley, A. L. Goldberger. *Phys. Rev. E*, 49, 1685 (1994). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.49.1685>
 30. M. S. Taqqu, V. Teverovsky, W. Willinger. *Fractals*, 03(04), 785 (1995). <https://doi.org/10.1142/s0218348x95000692>
 31. M. J. Cannon, D. B. Percival, D. C. Caccia, G. M. Raymond, J. B. Bassingthwaighe. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 241(3-4), 606 (1997). [https://doi.org/10.1016/s0378-4371\(97\)00252-5](https://doi.org/10.1016/s0378-4371(97)00252-5)
 32. N. Vandewalle, M. Ausloos. *Phys. Rev. E*, 58(5), 6832 (1998). <https://doi.org/10.1103/physreve.58.6832>
 33. A. Eke, P. Hermán, J. Bassingthwaighe, G. Raymond, D. Percival, M. Cannon, ... C. Ikrényi. *Pflügers Archiv - European Journal of Physiology*, 439(4), 403 (2000). <https://doi.org/10.1007/s004249900135>
 34. S. M. Prigarin, K. Hahn, G. Winkler. *Numerical Analysis and Applications*, 2(4), 352 (2009). <https://doi.org/10.1134/s1995423909040077>
 35. M. A. Riley, S. Bonnette, N. Kuznetsov, S. Wallot, J. Gao. *Frontiers in Physiology*, 3 (2012). <https://doi.org/10.3389/fphys.2012.00371>
 36. M. J. Sánchez-Granero, M. Fernández-Martínez, J. Trinidad-Segovia. *The European Physical Journal B*, 85(3), 86 (2012). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-20803-2>
 37. T. Gneiting, H. Sevcikova and D. B. Percival. *Statist. Sci.*, 27, 247 (2012). <https://doi.org/10.1214/11-STS370>
 38. M. S. Taqqu. *Stochastic Processes and Their Applications*, 7(1), 55 (1978). [https://doi.org/10.1016/0304-4149\(78\)90037-6](https://doi.org/10.1016/0304-4149(78)90037-6)
 39. H. E. Hurst, R. P. Black, Y. M. Simaika. *Long-term storage: an experimental study*, London, Constable (1965), 145 p. <https://doi.org/10.2307/2982267>
 40. О. В. Лазоренко, А. А. Онищенко, Л. Ф. Чорногор. *Радіотехніка: Всеукр. наук.-тех. збір.*, 210. 177 (2022). <https://doi.org/10.30837/rt.2022.3.210.15>
 41. C. Bandt, M. Barnsley, R. Devaney, K. J. Falconer, V. Kannan, P. B. Vinod Kumar, editors. *Fractals, Wavelets, and their Applications: Contributions from the Int. Conference and Workshop on Fractals and Wavelets (Springer Proceedings in Mathematics & Statistics)*, Switzerland, Springer Int. Publ. (2014), 508 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Wavelets-their-Applications-Contributions-ebook/dp/B00PUM0AQ2>

REFERENCES

1. B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*, San Francisco, CA-Freeman (1982), 460 p. <https://doi.org/10.1119/1.13295>
2. K. J. Falconer. *Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications*, Chichester, Wiley & Sons (1990), 288 p. <https://doi.org/10.1002/0470013850>
3. J. Feder. *Fractals*, New York, Plenum Press (1988), 305 p. <https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4899-2124-6>
4. E. Chandrasekhar, V. P. Dimri, V. M. Gadre, editors. *Wavelets and Fractals in Earth System Sciences*, CRC Press (2014), 294 p. <https://doi.org/10.1201/b16046>
5. D. P. Feldman. *Chaos and Fractals. An Elementary Introduction*, Oxford, University Press (2012), 408 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199566433.001.0001>
6. B. B. Mandelbrot. *Fractals and Chaos: The Mandelbrot Set and Beyond*, Springer (2005), 400 p. <https://doi.org/10.1186/1475-925X-4-30>
7. R. M. Crownover. *Introduction to Fractals and Chaos*, Boston, Jones and Barlett Publishers (1995), 320 p. <https://www.amazon.com/Introduction-Fractals-Chaos-Bartlett-Mathematics/dp/0867204648>
8. B. B. Mandelbrot. *Multifractals and 1/f Noise*, Springer (1999),

- 442 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2150-0>
9. D. Harte. Multifractals. Theory and Applications, Boca Raton, Chapman and Hall/CRC Press (2001), 264 p. <https://doi.org/10.1201/9781420036008>
10. M. Schroeder. Fractals, Chaos, Power Laws. Minutes from Infinite Paradise, New York, W. H. Freeman and Company (1991), 528 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Chaos-Power-Laws-Infinite/dp/0486472043>
11. F. C. Moon. Chaotic Vibrations. An Introduction for Applied Scientists and Engineers, New York, Wiley and Sons (2004), 309 p. <https://doi.org/10.1002/3527602844>
12. O. V. Lazorenko, L. F. Chernogor. Radio Phys. Radio Astron., 25 (1), 3 (2020) (in Russian). <https://doi.org/10.15407/rpra25.01.003>
13. V. V. Yanovsky. Universitates, 3, 32 (2003) (In Russian).
14. V. V. Yanovsky. Lectures on Nonlinear Phenomena. Volume 1, Kharkiv, Institut monokristallov Publ. (2006), 456 p. (in Russian).
15. L. F. Chernogor. On the Nonlinearity in Nature and Science, Kharkiv, V. N. Karazin Kharkiv National University (2008), 528 p. (In Russian).
16. O. V. Lazorenko, L. F. Chernogor. Radio Phys. Radio Astron., 28(1), 5 (2023) (in Ukrainian). <https://doi.org/10.15407/rpra28.01.005>
17. H. E. Hurst. Trans. Amer. Soc. Civ. Eng., 116, 770 (1951).
18. H. E. Hurst, R. P. Black, Y. M. Simaika. Long-term storage: an experimental study, London, Constable (1965), 145 p.
19. L. F. Chernogor, O. V. Lazorenko, A. A. Onishchenko. Low Temperature Physics, 49(4), 459 (2023). <https://doi.org/10.1063/10.0017581>
20. H. H. Hardy, R. A. Beier. Fractals in Reservoir Engineering. Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, World Scientific (1994), 359 p. <https://doi.org/10.1142/2574>
21. L. Seuront. Fractals and Multifractals in Ecology and Aquatic Science, Boca Raton, London, New York, CRC Press (2010), 344 p. <https://doi.org/10.1201/9781420004243>
22. B. Mandelbrot, J. R. Wallis. Water Resources Res., 5(1) 228 (1969). <https://doi.org/10.1029/WR005I001P00228>
23. J. B. Bassingthwaighe. News Physiol. Sci., 3, 5 (1988). <https://doi.org/10.1152/physiologyonline.1988.3.1.5>
24. N. Scafetta, P. Grigolini. Phys. Rev. E, 66(3), 036130 (2002). <https://doi.org/10.1103/physreve.66.036130>
25. J. H. Van Beek, S. A. Roger, J. B. Bassingthwaighe. Am. J. Physiol., 257(5), H1670 (1989). <https://doi.org/10.1152/ajpheart.1989.257.5.h1670>
26. H. M. Hastings, G. Sugihara. Fractals: A User's Guide for the Natural Science, Oxford, Oxford University Press (1993), 248 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Natural-Sciences-Science-Publications/dp/0198545975>
27. R. F. Peltier, J. Lévy-Véhel. Research report, INRIA Rocquencourt (1994). <https://hal.inria.fr/inria-00074279>
28. J. Beran. Statistics for Long-Memory Processes, Chapman and Hall (1994), 328 p. <https://doi.org/10.2307/2983481>
29. C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley, A. L. Goldberger. Phys. Rev. E., 49, 1685 (1994). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.49.1685>
30. M. S. Taqqu, V. Teverovsky, W. Willinger. Fractals, 03(04), 785 (1995). <https://doi.org/10.1142/s0218348x95000692>
31. M. J. Cannon, D. B. Percival, D. C. Caccia, G. M. Raymond, J. B. Bassingthwaighe. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 241(3-4), 606 (1997). [https://doi.org/10.1016/s0378-4371\(97\)00252-5](https://doi.org/10.1016/s0378-4371(97)00252-5)
32. N. Vandewalle, M. Ausloos. Phys. Rev. E, 58(5), 6832 (1998). <https://doi.org/10.1103/physreve.58.6832>
33. A. Eke, P. Hermán, J. Bassingthwaighe, G. Raymond, D. Percival, M. Cannon, ... C. Ikrényi. Pflügers Archiv - European Journal of Physiology, 439(4), 403 (2000). <https://doi.org/10.1007/s004249900135>
34. S. M. Prigarin, K. Hahn, G. Winkler. Numerical Analysis and Applications, 2(4), 352 (2009). <https://doi.org/10.1134/s1995423909040077>
35. M. A. Riley, S. Bonnette, N. Kuznetsov, S. Wallot, J. Gao. Frontiers in Physiology, 3 (2012). <https://doi.org/10.3389/fphys.2012.00371>
36. M. J. Sánchez-Granero, M. Fernández-Martínez, J. Trinidad-Segovia. The European Physical Journal B, 85(3), 86 (2012). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-20803-2>
37. T. Gneiting, H. Sevcikova and D. B. Percival. Statist. Sci., 27, 247 (2012). <https://doi.org/10.1214/11-STS370>
38. M. S. Taqqu. Stochastic Processes and Their Applications, 7(1), 55 (1978). [https://doi.org/10.1016/0304-4149\(78\)90037-6](https://doi.org/10.1016/0304-4149(78)90037-6)
39. H. E. Hurst, R. P. Black, Y. M. Simaika. Long-term storage: an experimental study, London, Constable (1965), 145 p. <https://doi.org/10.2307/2982267>
40. O. V. Lazorenko, A. A. Onishchenko, L. F. Chernogor. Radiotekhnika: All-Ukr. Sci. Inter- dep. Mag., 210. 177 (2022). (in Ukrainian). <https://doi.org/10.30837/rt.2022.3.210.15>
41. C. Bandt, M. Barnsley, R. Devaney, K. J. Falconer, V. Kannan, P. B. Vinod Kumar, editors. Fractals, Wavelets, and their Applications: Contributions from the Int. Conference and Workshop on Fractals and Wavelets (Springer Proceedings in Mathematics & Statistics), Switzerland, Springer Int. Publ. (2014), 508 p. <https://www.amazon.com/Fractals-Wavelets-their-Applications-Contributions-ebook/dp/B00PUM0AQ2>

ОСОБЛИВОСТІ ОЦІНЮВАННЯ ПОКАЗНИКА ХЕРСТА ДЛЯ ПРИРОДНИХ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

О. В. Лазоренко¹, А. А. Онищенко², І. А. Таранова¹, М. А. Удовенко¹

¹*Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна*

²*Харківський національний університет радіоелектроніки, пр. Науки, 14, 61166 Харків, Україна*

E-mail: Oleg.V.Lazorenko@karazin.ua

Надійшла до редакції 05 квітня 2024 р. Переглянуто 11 травня 2024 р.

Прийнято до друку 14 травня 2024 р.

У відповідності до нелінійної та системної парадигм, сформульованих Л. Ф. Чорногором наприкінці 1980-х років, всі процеси у відкритих, нелінійних, динамічних системах є дуже складними, нелінійними, надширокосмуговими або фрактальними.

Як стверджує фрактальна парадигма, висунута на початку 2000-х років В. В. Яновським, фрактальність взагалі є однією із фундаментальних властивостей навколишнього світу. Тому вивчення фрактальних характеристик, зокрема, природних фізичних процесів є актуальним, цікавим і корисним.

Фрактальна розмірність, що базується на показникові Херста, є однією із найстаріших і найвідоміших. На основі дослідження модельних фрактальних сигналів продемонстровано, що залежність між оцінкою херстової фрактальної розмірності, що отримується методом нормованого розмаху, та істинним її значенням є істотно нелінійною. Для зменшення впливу похибок, що виникають у результаті цього, запропоновано використовувати метод коригуючої функції.

Продemonстровано практичну ефективність запропонованого методу на прикладі аналізу експериментальних результатів, отриманих ще в середині 1960-х років Г. Е. Херстом, який виявив наявність дещо дивного групування отриманих ним значень херстової фрактальної розмірності навколо величини 1.27 для різних природних фізичних процесів. Висунуто гіпотезу про можливість пояснення цього факту саме нелінійністю згаданої залежності для методу нормованого розмаху.

Ключові слова: *нелінійна парадигма, природний фізичний процес, фрактальна парадигма, фрактальний аналіз, фрактальна розмірність, коригуюча функція, метод нормованого розмаху, показник Херста*

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-03>

UDC 53.092+537.311+537.312+538.91+539.374+669.715

PACS numbers: 74.72.-h, 74.72.Bk, 74.62.Fj, 74.62.Dh

ЕВОЛЮЦІЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ЕЛЕКТРООПОРУ МОНОКРИСТАЛІВ $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ В ШИРОКОМУ ІНТЕРВАЛІ ПРИКЛАДНОГО ТИСКУ І КОНЦЕНТРАЦІЙ ДОМІШОК ПРАЗЕОДИМУ

Г. Я. Хаджай¹ , В. Ф. Коршак¹ , М. Г. Ревякіна¹, О. Л. Чикіна¹,
А. О. Комісаров¹, О. Ю. Врагов¹ , Джуны Ду^{1,2}, Л. О. Пащенко¹ , Р. В. Вовк¹ 

¹Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

²Школа математичних наук Лоянського педагогічного університету, 471934 Лоян, Китай

E-mail: rvvovk2017@gmail.com

Надійшла до редакції 15 квітня 2024 р. Переглянуто 19 травня 2024 р.

Прийнято до друку 22 травня 2024 р.

У роботі досліджено вплив високого гідростатичного тиску $0 \leq P \leq 17$ кбар на електричний опір $\rho(T)$ у базисній ab -площині допованих празеодимом монокристалів системи $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при $0 \leq x \leq 0.34$. Монокристали сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ вирошували за розчин-розплавною технологією в золотому тиглі. Гідростатичний тиск створювали у мультиплікаторі типу поршень-циліндр. Тиск визначали манганіновим манометром, температуру – мідь-константановою термopарою. Встановлено, що збільшення тиску приводить до зростання критичної температури досліджених сполук та до зменшення їх електричного опору, що відповідає літературним даним для полікристалічних зразків. Поблизу надпровідного переходу вигляд температурних похідних електричного опору $d\rho/dT$ сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ свідчить про певну неоднорідність зразків, тобто про наявність у зразках областей з різними температурами надпровідного переходу T_c , що переходять у надпровідний стан у міру досягнення T_c . При проміжних концентраціях празеодиму такі області переходять у надпровідний стан послідовно, але при $x = 0$ та $x = 0.34$ вигляд $d\rho/dT$ свідчить про наявність перколяційних шляхів протікання транспортного струму. Значення T_c та літературні дані відносно температури Дебая вказують на те, що формула МакМіллана може бути застосованою тільки для таких сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, які мають $T_c \leq 65$ К (тобто, для $x, \delta > 0.3$), і дає при цьому дуже високі значення константи електрон-фононої взаємодії, $\lambda \sim 1$. Виявлено, що, на відміну від бездомішкових зразків $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з оптимальним вмістом кисню, прикладання високого тиску приводить до кратного зростання величини баричної похідної dT_c/dP . Встановлено, що, в межах експериментально досягнутих тисків, не реєструється зміна знаку баричних похідних dT_c/dP при збільшенні тиску, що спостерігалось на полікристалічних зразках з близькими значеннями концентрації празеодиму. Обговорюються можливі механізми впливу високого тиску на критичну температуру переходу в надпровідний стан T_c з урахуванням особливостей в електронному спектрі носіїв.

Ключові слова: монокристали $YBaCuO$, допування празеодимом, гідростатичний тиск, фазове розширювання, баричні похідні.

Як цитувати: Г. Я. Хаджай, В. Ф. Коршак, М. Г. Ревякіна, О. Л. Чикіна, А. О. Комісаров, О. Ю. Врагов, Джуны Ду, Л. О. Пащенко, Р. В. Вовк. Еволюція температурних залежностей електроопору монокристалів $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в широкому інтервалі прикладеного тиску і концентрацій домішок празеодиму. Вісник ХНУ імені В. Н. Каразіна. Серія «Фізика». Вип. 40, 2024, 35–40. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-03>

In cites: G. Ya. Hadzhai, V. F. Korshak, M. G. Revyakina, O. L. Chykina, A. O. Komisarov, O. Yu. Vragov, Junyi Du, L. O. Pashchenko, R. V. Vovk. Evolution of the temperature dependences of electrical resistance of $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals in a wide range of applied pressure and concentrations of praseodymium impurities. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 35–40. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-03> (in Ukrainian).

ВСТУП

Відомо, що сполуки $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Y}$ та інші рідкоземельні елементи) є технологічно важливими структурами для отримання новітніх перспективних матеріалів з високою струмонесучою здатністю, забезпечення компонентів для виготовлення осередків пам'яті, надчутливих елементів зчитування та надшвидкісних ліній зв'язку на основі ВТНП. Характерною особливістю ВТНП-купратів є наявність широкої ділянки надлишкової провідності $\Delta\sigma$ нижче певної температури T^* . На температурних залежностях електричного опору $\rho(T)$ це відображається відхиленням донизу від високотемпературної лінійної ходи. Важливу роль при цьому відіграє склад та топологія дефектного ансамблю, що визначають умови протікання транспортного струму та механізми розсіювання носіїв. Як відомо [1, 2], зміна ступеня відхилення від кисневої стехіометрії та допування домішками празеодиму є ефективними методами модифікування електротransпортних характеристик та зміни критичних параметрів високотемпературних надпровідних сполук системи $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. При цьому, однак, збільшення ступеня дефіциту кисню до $\delta \geq 0.15$ часто приводить до виникнення в системі нерівноважного стану [3], який може бути досить легко індукований прикладанням високого тиску [1], стрибкоподібною зміною температури [4] або виникати в результаті тривалого зберігання [5] експериментальних зразків. Такий нерівноважний стан, як правило, супроводжується досить інтенсивно протікаючими процесами структурної релаксації [1], які, зі свого боку, істотно впливають на цілу низку фізичних характеристик цієї сполуки, у тому числі магніторезистивних. Внесення домішок празеодиму, у разі оптимально допованих киснем зразків $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, як свідчать відомі літературні джерела (див., наприклад [1, 2]), не впливає на реалізацію нерівноважного стану в цій сполуці, що дозволяє, шляхом порівняльного аналізу, виділити роль та механізми впливу перерозподілу лабільного кисню на електротransпортні характеристики досліджуваних зразків. Водночас, прикладання високого тиску приводить до виникнення деяких особливостей у поведінці баричних залежностей резистивних характеристик цієї ВТНП-системи [1].

Згідно з літературними даними [2, 3], прикладання високого тиску до зразків високотемпературних надпровідних сполук системи $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($\text{R} = \text{Y}$, або лантаноїди), у переважній більшості випадків, приводить до істотного зростання величини критичної температури переходу в надпровідний стан зі швидкостями $dT_c/dP \approx (0.1-3)$ кбар. Виняток при цьому складають сполуки системи $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, у яких, при певних значеннях концентрації празеодиму,

можуть спостерігатися як позитивні, так і негативні значення баричної похідної dT_c/dP а в окремих випадках і зміна її знаку в міру зростання прикладеного тиску [1]. Подібні особливості автори, як правило, пояснюють проявом, так званої, “аномалії празеодиму” – пригнічення провідних і надпровідних характеристик сполуки $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при внесенні домішок празеодиму. При цьому критична температура зменшується від $T_c \approx 90$ К, при $x = 0$, до повного зникнення надпровідності, при $x \approx 0.7$ [1].

На сьогодні існують декілька теоретичних моделей, присвячених поясненню виникнення “аномалії празеодиму”, найбільш відомими з яких є “hole filling model”, “pair breaking phenomena”, а також моделі, що передбачають локалізацію діркових носіїв та, обумовлені взаємодією з іонами празеодима, різні уявлення про механізми перебудови зонних станів (огляд [1]). Дискусія з цього питання продовжується дотепер. З огляду на обмежений обсяг нашого повідомлення, ми не проводимо тут докладний аналіз цих явищ, залишаючи його для окремої роботи.

Слід також зауважити, що значна частина експериментальних даних, отриманих при дослідженні впливу високого тиску на транспортні характеристики сполук $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, була отримана на керамічних, плівкових чи текстурованих зразках з вельми різною технологічною передісторією [1]. Водночас найбільш інформативними, у цьому сенсі, є дослідження на монокристалічних зразках, як найбільш досконалих об'єктах, у яких практично відсутні такі структурні дефекти як міжгранулярні межі й дислокації невідповідності на границі розділення плівка – підкладина тощо.

У цій роботі були проведені вимірювання електроопору $\rho(T)$ у базисній ab -площині на досконалих монокристалічних зразках $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ у широкому інтервалі тиску ($0 \leq P \leq 17$ кбар) та концентрації празеодиму ($0 \leq x \leq 0.34$).

МЕТОДИКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

ВТНП-монокристали сполук $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ вирощували за розчин-розплавною технологією в золотому тиглі, згідно з методикою, розробленою авторами [3]. Для проведення резистивних досліджень відбирали кристали прямокутної форми розміром приблизно $3 \times 0.5 \times 0.03$ мм³. Найменший розмір кристала відповідав напрямку c -осі. Електричні контакти створювали за стандартною 4-х контактною схемою шляхом нанесення срібної пасти на поверхню кристала з наступним приєднанням срібних провідників діаметром 0.05 мм та тригодинним відпалом при температурі 200 °С в атмосфері кисню. Така процедура дозволяла отримати перехідний опір

контактів менше одного Ома та проводити резистивні вимірювання при транспортних струмах до 10 мА в ab -площині. Гідростатичний тиск створювали у мультиплікаторі типу поршень-циліндр [2, 3]. Величину тиску визначали за допомогою манганінового манометра, температуру – мідь-константанової термопари, вмонтованої у зовнішню поверхню камери на рівні положення зразка.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 1–рис. 4 наведено залежності $\rho(T)$ в інтервалі температур від кімнатної до критичної, отримані у випадку прикладання високого тиску до ~ 17 кбар до зразків з різною концентрацією празеодиму ($x = 0$ –0.34). Як видно з цих рисунків, при збільшенні тиску критична температура збільшується, а електроопір $\rho(T)$ зменшується, що якісно узгоджується з літературними даними для полікристалічних зразків [1].

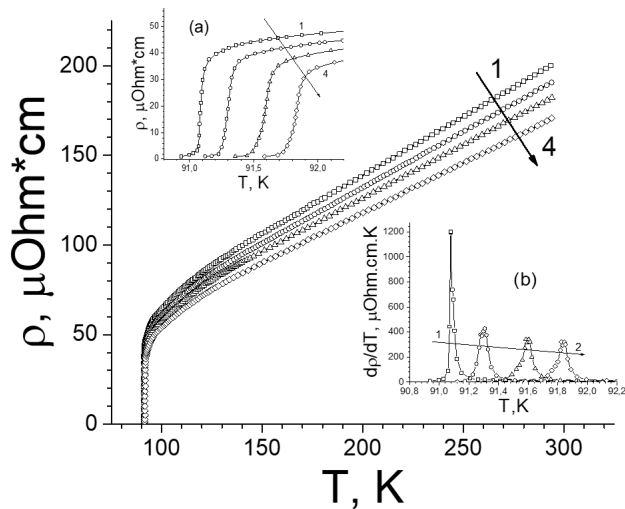


Рис. 1. Температурні залежності електроопору у базисній площині $\rho(T)$ монокристала $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, виміряні для $x = 0$ за тисків P : 0; 2.5; 6.51; 9.5 кбар – криві 1–4 відповідно. Вставка (а): резистивний перехід до надпровідного стану. Вставка (б): $d\rho(T)/dT$ в області надпровідного стану. Нумерація кривих на вставках відповідає нумерації на основній панелі.

Fig. 1. Temperature dependences of electrical resistivity in the basal plane $\rho(T)$ of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal, measured for $x = 0$ at pressures, P : 0; 2.5; 6.51; 9.5 kbar – curves 1–4, respectively. Inset (a): resistive transition to the superconducting state. Inset (b): $d\rho(T)/dT$ in the region of the superconducting state. The numbering of the curves in the insets corresponds to the numbering in the main panel.

На вставках (а) та (б) до рис. 1 показано резистивні переходи в надпровідний стан в координатах $\rho(T)$ vs T , та $d\rho(T)/dT$ vs T . Як видно зі вставок, на надпровідних переходах зразків з нульовою та максимальною концентрацією празеодиму практично відсутня східчаста структура, яка спостерігалась для двох проміжних концентрацій празеодиму – рис. 2 та рис. 3. Наявність східчастої структури може вважатися достовірною ознакою присутності в системі макроскопічних областей з різними T_c [3], які з'єднані послідовно та переходять у надпровідний стан у міру досягнення T_c . Водночас відсутність таких сходинок на резистивних переходах нашого зразка може бути ознакою існування в об'ємі зразка перколяційних шляхів протікання транспортного струму [2, 3], коли одна з областей шунтує інші.

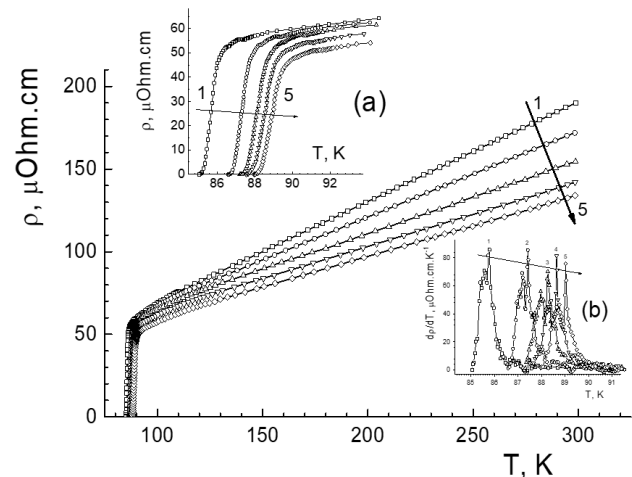


Рис. 2. Температурні залежності електроопору у базисній площині $\rho(T)$ монокристала $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, виміряні для $x = 0.05$ за тисків P : 0; 4.52; 9.17; 12.74; 17.05 кбар – криві 1–5 відповідно. Вставка (а): резистивний перехід до надпровідного стану. Вставка (б): $d\rho(T)/dT$ в області надпровідного стану. Нумерація кривих на вставках відповідає нумерації на основній панелі.

Fig. 2. Temperature dependences of electrical resistivity in the basal plane $\rho(T)$ of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal, measured for $x = 0.05$ at pressures, P : 0; 4.52; 9.17; 12.74; 17.05 kbar – curves 1–5, respectively. Inset (a): resistive transition to the superconducting state. Inset (b): $d\rho(T)/dT$ in the region of the superconducting state. The numbering of the curves in the insets corresponds to the numbering in the main panel.

Залежності $T_c(P)$ для досліджених зразків показано на рис. 5. Видно, що швидкість зростання критичної температури з тиском збільшується з ростом x та досягає для зразка з максимальним вмістом

празедиміу $dT_c/dP \approx 0.33$ К/кбар в інтервалі експериментально досягнутих тисків. Також видно, що для кожної концентрації Pr максимальне зростання критичної температури спостерігається в інтервалі тисків від 0 до 3–4 кбар, після чого величина баричної похідної, dT_c/dP , кратно зменшується, про що більш детально буде сказано нижче.

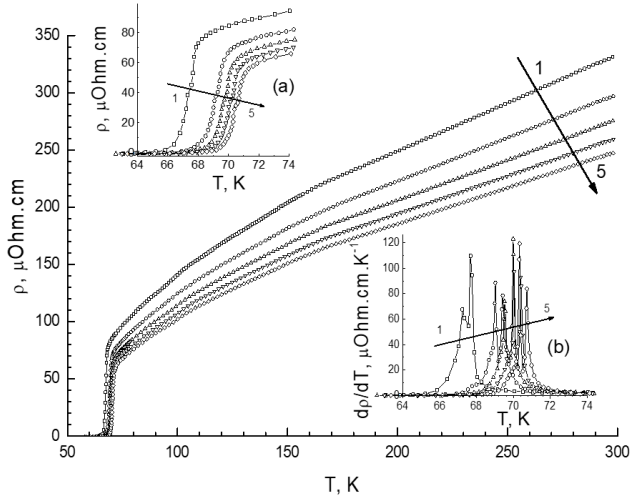


Рис. 3. Температурні залежності електроопору у базисній площині $\rho(T)$ монокристала $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, виміряні для $x = 0.23$ за тисків P : 0; 4.1; 6.4; 8.7; 11 кбар – криві 1–5 відповідно. Вставка (а): резистивний перехід до надпровідного стану. Вставка (б): $d\rho(T)/dT$ в області надпровідного стану. Нумерація кривих на вставках відповідає нумерації на основній панелі.

Fig. 3. Temperature dependences of electrical resistivity in the basal plane $\rho(T)$ of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal, measured for $x = 0.23$ at pressures, P : 0; 4.1; 6.4; 8.7; 11 kbar – curves 1–5, respectively. Inset (a): resistive transition to the superconducting state. Inset (b): $d\rho(T)/dT$ in the region of the superconducting state. The numbering of the curves in the insets corresponds to the numbering in the main panel.

Як відзначалося нами в попередніх роботах, значення величини баричної похідної до $dT_c/dP \leq 0.2$ К/кбар можуть бути успішно пояснені з використанням для якісного аналізу залежностей $T_c(P)$ відомої формули МакМіллана [6]:

$$T_c = \frac{\theta_D}{1.45} \exp\left[-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}\right], \quad (1)$$

де θ_D – температура Дебая, μ^* – екранований кулонівський псевдопотенціал, що характеризує відштовхування електронів, λ – константа електрон-фононної взаємодії, яка, зі свого боку, залежить від

параметрів електронного та фононного спектрів надпровідника:

$$\lambda = \frac{N(\varepsilon_F) \langle I^2(\vec{k}-\vec{k}') \rangle}{M\theta_D^2}, \quad (2)$$

де $N(\varepsilon_F)$ – густина станів на рівні Фермі, I – усереднений по поверхні Фермі матричний елемент електрон-фононної взаємодії, M – маса іона.

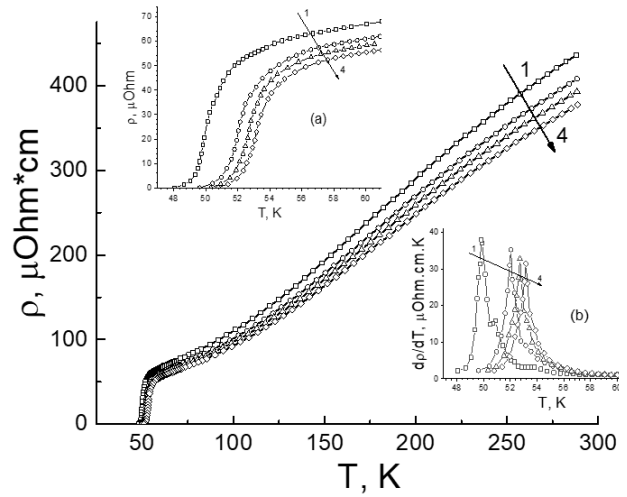


Рис. 4. Температурні залежності електроопору у базисній площині $\rho(T)$ монокристала $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, виміряні для $x = 0.34$ за тисків P : 0; 3.72; 6.53; 9.7 кбар – криві 1–4 відповідно. Вставка (а): резистивний перехід до надпровідного стану. Вставка (б): $d\rho(T)/dT$ в області надпровідного стану. Нумерація кривих на вставках відповідає нумерації на основній панелі.

Fig. 4. Temperature dependences of electrical resistivity in the basal plane $\rho(T)$ of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal, measured for $x = 0.34$ at pressures, P : 0; 3.72; 6.53; 9.7 kbar – curves 1–4, respectively. Inset (a): resistive transition to the superconducting state. Inset (b): $d\rho(T)/dT$ in the region of the superconducting state. The numbering of the curves in the insets corresponds to the numbering in the main panel.

Як було показано в [7], формула МакМіллана цілком коректна лише за $\lambda \leq 1.5$. Значення $\lambda \leq 1.5$ можна отримати, якщо величина $\ln(1.45*T_c/\theta)$ буде знаходитися в межах від -10 до -2 . Для $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ та $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ це реалізується в інтервалі $x, \delta > 0.3$. У [8] наводяться дані про кореляцію між T_c та λ (λ обчислена за формулою МакМіллана для $\mu^* = 0.13$) для 12 перехідних металів. На вставці до рис. 5 наведено ці дані разом з аналогічними даними для $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ та $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [7]. Видно, що тільки для $T_c \leq 65$ К дані для перехідних металів узгоджуються з даними для $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ та $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Це свідчить про сильну електрон-

фононну взаємодію в цих речовинах. Для $T_c \geq 65$ K ($x, \delta < 0.3$) λ різко зростає, а потім переходить у негативну область. Таким чином, ВТНП $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ та $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ можна назвати надпровідниками з сильним зв'язком тільки після $x, \delta > 0.3$, при менших значеннях x або δ формула МакМіллана очевидно не може бути застосована.

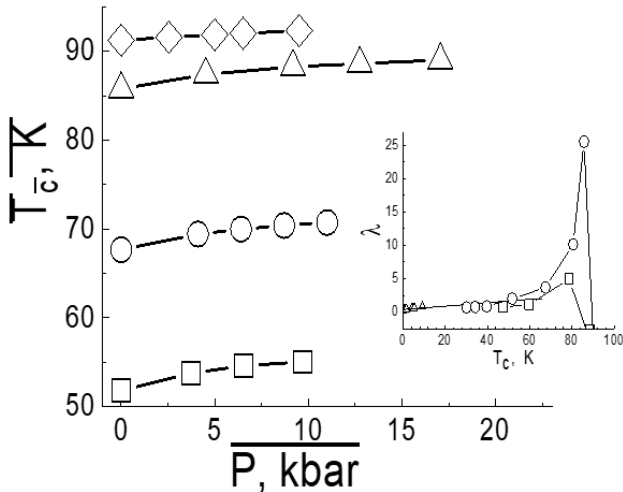


Рис. 5. Баричні залежності T_c монокристалів $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ для $x = 0$ (◇); $x = 0.05$ (Δ); $x = 0.23$ (○); $x = 0.34$ (□). На вставці показано кореляцію між T_c та λ , обчислену за формулою МакМіллана: $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – □; $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – ○; 12 перехідних металів – Δ [8].

Fig. 5. Baric dependences of T_c of $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals for $x = 0$ (◇); $x = 0.05$ (Δ); $x = 0.23$ (○); $x = 0.34$ (□). The inset shows the correlation between T_c and λ , calculated according to McMillan's formula: $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – □; $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ – ○; 12 transition metals – Δ [8].

Крім того, як зазначалося вище, в [1] спостерігали зміну знака dT_c/dP . Усе вищесказане не дозволяє однозначно інтерпретувати отримані дані в рамках теорії БКШ. Вірогідно такі значення величини dT_c/dP , а також кратне зменшення величини dT_c/dP з ростом тиску можуть бути пов'язані з особливостями зонної структури сполуки $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [9]. Слід також зазначити, що, в межах експериментально досягнутих тисків, ми не зареєстрували зміни знаку баричних похідних dT_c/dP при збільшенні тиску, що спостерігалось в [1] на полікристалічних зразках з близькими значеннями концентрації празеодиму. Очевидно, що для остаточного прояснення цього питання потрібні додаткові дослідження на зразках з більш високим вмістом празеодиму і в більш широкому діапазоні прикладеного тиску.

ВИСНОВКИ

Результати, що викладені вище, дозволяють зробити такі висновки:

1. При збільшенні тиску критична температура сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($0 \leq x \leq 0.34$) збільшується, а електроопір зменшується, що якісно узгоджується з літературними даними для полікристалічних зразків.

2. Поблизу надпровідного переходу температурні похідні опору сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при проміжних концентраціях празеодиму демонструють наявність у зразках областей з різними T_c , що переходять у надпровідний стан послідовно. При $x = 0$ та $x = 0.34$ така поведінка відсутня, що вказує на наявність перколяційних шляхів протікання транспортного струму.

3. Формула МакМіллана може бути застосованою тільки для сполук $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ з $T_c \leq 65$ K ($x, \delta > 0.3$), і дає при цьому дуже високі значення константи електрон-фононної взаємодії, $\lambda \sim 1$.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори повідомляють про відсутність конфлікту інтересів.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

REFERENCES

1. M. Akhavan. Physica B, 321, 265 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(02\)00860-8](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(02)00860-8)
2. R. V. Vovk, A. L. Solovyov. Low Temp. Phys., 44, 81 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5020905>
3. D. D. Balla, A. V. Bondarenko, R. V. Vovk, M. A. Obolenskii, and A. A. Prodan. Low Temp. Phys., 23, 777 (1997). <https://doi.org/10.1063/1.593445>
4. M. A. Obolenskii, A. V. Bondarenko, R. V. Vovk, A. A. Prodan. Low Temp. Phys., 23 (11), 882 (1997). <https://doi.org/10.1063/1.593496>
5. R. V. Vovk, N. R. Vovk, G. Y. Khadzha, O. V. Dobrovolskiy, Z. N. Nazyrov, J. Mater. Sci.: Mater. Electr., 25 (12), 5226 (2014). <https://doi.org/10.1007/s10854-014-2292-5>
6. W. L. McMillan. Phys. Rev., 167, 331 (1968). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.167.331>
7. G. Ya. Khadzha, A. V. Matsepulin, A. Chroneos, I. L. Goulatis, R. V. Vovk. Solid State Communications, 327, 114205 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114205>
8. S. V. Vonsovskiy, Y. A. Izyumov, E. Z. Kurmaev, Superconductivity of Transition Metals, Springer, Berlin Heidelberg (2011), 512 p.
9. U. Schwingensclogl and C. Schuster. Appl. Phys. Lett., 100, 253111 (2012).

EVOLUTION OF THE TEMPERATURE DEPENDENCES OF ELECTRICAL RESISTANCE OF $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTALS IN A WIDE RANGE OF APPLIED PRESSURE AND CONCENTRATIONS OF PRASEODIMIUM IMPURITIES

G. Ya. Hadzhai¹, V. F. Korshak¹, M. G. Revyakina¹, O. L. Chykina¹,
A. O. Komisarov¹, O. Yu. Vragov¹, Junyi Du^{1,2}, L. O. Pashchenko¹, R. V. Vovk¹

¹V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine

²School of Mathematical Sciences, Luoyang Normal University, 471934 Luoyang, China

E-mail: rvovk2017@gmail.com

Received on April 15, 2024. Reviewed on May 19, 2024.

Accepted for publication on May 22, 2024.

The effect of high hydrostatic pressure $0 \leq P \leq 17$ kbar on the electrical resistance $\rho(T)$ in the basic *ab*-plane of praseodymium-doped single crystals of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ system at $0 \leq x \leq 0.34$ was investigated in the paper. Single crystals of compounds $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ were grown by solution-melt technology in a gold crucible. Hydrostatic pressure was created in a piston-cylinder multiplier. The pressure was determined with a manganin manometer, and the temperature – with a copper-constantane thermocouple. It was established that an increase in pressure leads to an increase in the critical temperature of the studied compounds and a decrease in their electrical resistance, which corresponds to literature data for polycrystalline samples. Near the superconducting transition, the appearance of the temperature derivatives of the electrical resistance, $d\rho/dT$, of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ compounds indicates a certain heterogeneity of the samples, i.e., the presence of areas in the samples with different temperatures of the superconducting transition, T_c , which transition to the superconducting state as T_c is reached. At intermediate concentrations of praseodymium, such regions pass into the superconducting state sequentially, but at $x = 0$ and $x = 0.34$, the form $d\rho/dT$ indicates the presence of percolation paths for the flow of the transport current. The value of T_c and literature data on the Debye temperature indicate that the McMillan formula can be applied only to compounds $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ that have $T_c < 65$ K (that is, for $x, \delta > 0.3$), and at the same time gives a very high values of the electron-phonon interaction constant, $\lambda \sim 1$. It was found that, in contrast to pure $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ samples with optimal oxygen content, the application of high pressure leads to a multiple increase in the value of the baric derivative dT_c/dP . It was established that within the limits of experimentally achieved pressures, there was no change in the sign of baric derivatives dT_c/dP with increasing pressure, which was observed on polycrystalline samples with close values of praseodymium concentration. The possible mechanisms of the effect of high pressure on the critical temperature of the transition to the superconducting state T_c are discussed, taking into account the features in the electronic spectrum of carriers.

Keywords: *YBaCuO single crystals, praseodymium doping, hydrostatic pressure, phase separation, baric derivatives.*

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2024-40-04>

UDC: 538.945, 537.5, 544.2

PACS numbers: 74.72.Bk, 74.45.c, 74.25.n

ОПРОМІНЮВАННЯ ФОТОНАМИ ТА «ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНА» ЕЛЕКТРИЧНА НАДПРОВІДНІСТЬ ПОЛІКОМПОНЕНТНИХ МЕТАЛ-ОКСИДНИХ СПОЛУК

Ю. І. Бойко¹, В. В. Богданов¹, Р. В. Вовк¹, Б. В. Гриньов²

¹Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

²Інститут цинтіляційних матеріалів НТЦ «Інститут монокристалів» НАН України, пр. Науки, 60, 61072 Харків, Україна
E-mail: bogdanov@karazin.ua

Надійшла до редакції 27 березня 2024 р. Переглянуто 06 травня 2024 р.

Прийнято до друку 15 травня 2024 р.

У роботі обговорюється можливість збільшення температури переходу метал-оксидних сполук ("високотемпературних" надпровідників) до надпровідного стану (нульовий електричний опір) при опромінюванні їх досить потужним потоком фотонів. У цьому випадку в опромінюваній речовині внаслідок внутрішньої фотоіонізації відбуваються зміни як важливих параметрів фононного спектру, так і енергетичного спектра електронів.

Величина енергії фотона має задовольняти таку умову: $h\nu \geq W$ (ν – частота фотона, W – енергія фотоіндукованої хімічної реакції. Згідно зі зробленими в роботі оцінками, мінімальна довжина хвилі фотонів, які можуть реалізувати описаний ефект, має характеризуватися значенням $\lambda \approx 10^{-4}$ м. Фотони такої довжини хвилі відповідають інфрачервоному світловому випромінюванню, потік достатньої потужності якого легко досягається лазерною технологією.

Зміна параметрів фононного спектра та енергетичного стану електронів в обговорюваних сполуках при опроміненні їх фотонами обумовлює утворення додаткової кількості скупчень спеціальних комплексів іонів (негативних U-центрів), які здатні генерувати квазічастинки: «куперовські» пари електронів (бозони).

Утворення скупчень негативних U-центрів (кластерів) призводить до формування особливого енергетичного спектра електронної підсистеми метал-оксидів, що допускає парні переходи електронів. Спарені електрони переносять електричний заряд без втрати енергії. Опромінювання оптичними фотонами полікомпонентних метал-оксидів інтенсифікує процес формування максимально можливої сумарної довжини кластерів з U-центрів, отже інтенсифікує процес переходу метал-оксидів у надпровідний стан: температура повного переходу цих сполук до надпровідного стану T_c може наближатися до значення температури відкриття псевдощільнини в енергетичному спектрі електронів, тобто цей перехід реалізується за більш високих температур, ніж це відбувається за звичайних умов.

Ключові слова: високотемпературна надпровідність, метал-оксидні сполуки, негативні U-центри, фотоіонізація.

Як цитувати: Ю. І. Бойко, В. В. Богданов, Р. В. Вовк, Б. В. Гриньов. Опромінювання фотонами та «високотемпературна» електрична надпровідність полікомпонентних метал-оксидних сполук. Вісник ХНУ імені В. Н. Каразіна. Серія «Фізика». Вип. 40, 2024, 41–46. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2024-40-04>

In cites: Yu. I. Boyko, V. V. Bogdanov, R. V. Vovk, B. V. Grinyov. Photon irradiation and "high-temperature" electrical superconductivity of polycomponent metal-oxide compounds. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 41–46. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2024-40-04> (in Ukrainian).

ВСТУП

Відкриття "високотемпературної" електричної надпровідності (нульовий електричний опір) полікомпонентних метал-оксидних сполук викликало величезний інтерес до досліджування цього класу речовин [1, 2]. До цих сполук відноситься цілий ряд речовин, які описуються загальною хімічною формулою $(R)Ba_2Cu_3O_{7-x}$, де R – це Y, Nd, La, Pr та ін, а також деякі складніші сполуки, до складу яких, крім зазначених вище іонів, входять також іони Bi, Te і Hg. Всі ці речовини переходять до надпровідного стану в інтервалі температур $\approx (90 - 160)$ K, тобто вище температури кипіння рідкого азоту (77 K). Саме ця обставина використана для обґрунтування того, що метал-оксидні сполуки були виділені в окремий клас так званих "високотемпературних" надпровідників на відміну від класичних (металевих) надпровідників, температура переходу яких характеризується інтервалом значень $\approx (1 - 40)$ K. У подальших дослідженнях, що відбулися після відкриття «високотемпературної» надпровідності, основні зусилля були спрямовані на пошук нових надпровідників, а також на знаходження умов, за яких метал-оксидні надпровідники характеризувались би ще вищою температурою переходу. При цьому стратегічною метою більшості досліджень є виявлення надпровідності при кімнатній температурі (300 K) і при нормальному (атмосферному) тиску. Вимога здійсненості цієї умови є дуже важливою для реалізації широкого та, найголовніше, економічно вигідного використання надпровідників у технічних цілях. Проте дотепер зазначена стратегічна мета численних досліджень, присвячених вивченню надпровідності, залишається недосягнутою. Однією з причин є відсутність однозначності в розумінні мікроскопічного механізму надпровідності метал-оксидних сполук. Спроби пояснити надпровідність цього класу речовин за допомогою теорії BCS (фононне спарювання електронів), яка описує «низькотемпературну» надпровідність металів та металевих сплавів, виявилася неприйнятною [3, 4]. При цьому детальне дослідження природи елементарних носіїв електричного заряду в метал-оксидах показало, що електрична провідність цих речовин при температурах $T \leq T_c$ реалізується за рахунок транспорту спарених електронів (бозонів), як і у разі класичних «низькотемпературних» надпровідників. У зв'язку з цим одним із актуальних напрямків досліджень надпровідності на даний час є з'ясування причин утворення спарених електронів у метал-оксидах. Природно, що більшість цих досліджень присвячена вивченню хімічної та кристалографічної будови цього класу речовин, оскільки визначають особливості будови як фононного

спектру, так і енергетичного спектру електронів, що, у свою чергу, визначає можливість генерування квантових квазічастинок – бозонів.

У цій роботі проведено аналіз кристалографічної будови та хімічного складу метал-оксидів, на підставі якого зроблено висновок про те, що визначальну роль у процесі формування надпровідного стану цих речовин відіграє «ізодемічна» (шарувата) будова їхньої кристалічної ґратки, а також можливість утворення різних хімічних зв'язків між іонами. У цих сполуках іон кисню O (аніон) утворює іонну та ковалентну хімічні зв'язки з іонами різних металів [5]. Такий специфічний характер зв'язку між іонами метал-оксидів зумовлює формування в них кристалічної структури з орторомбічною елементарною коміркою. При цьому важливу роль для надпровідності відіграє величина параметра x , що характеризує ступінь відхилення від стехіометрії метал-оксидів за киснем. При великому дефіциті іонів кисню ($x \geq 5$) формується кристалічна структура з іншою (тетрагональною) елементарною коміркою і надпровідність у такій структурі не виявляється. Зазначені особливості будови метал-оксидних сполук обумовлюють утворення в цих речовинах особливих іонних комплексів (негативних U-центрів), які здатні генерувати спарені електрони і, відповідно, реалізувати надпровідність цих речовин [6]. Відповідно до наведеної вище інформації, природно вважати, що утворення негативних U-центрів може бути суттєво активовано, якщо опромінювати метал-оксид досить потужним потоком оптичних фотонів. В цьому випадку в результаті ефекту внутрішньої фотоіонізації має посилюватися процес утворення негативних U-центрів, які згодом поєднуються в скупчення (кластери). Відповідно має активуватися і процес переходу метал-оксидів до надпровідного стану, тобто при опромінюванні фотонами цей перехід має реалізовуватися за більш високих температур, ніж це спостерігається у звичайних умовах.

У наступних розділах цієї статті описані причини формування особливого структурного стану метал-оксидів та зроблено кількісні оцінки величини можливого підвищення температури T_c переходу цих речовин до надпровідного стану при опромінюванні фотонами. Наводяться також експериментальні дані, що свідчать про правомірність зроблених висновків.

ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ТА КРИСТАЛОГРАФІЧНОЇ БУДОВИ МЕТАЛ-ОКСИДІВ

1) Насамперед, слід зазначити, що всі «високотемпературні» метал-оксидні надпровідники у своєму складі мають іон міді, а також деякі інші іони, які мають здатність змінювати свою валентність (Cu^{1+} ,

Cu^{2+} , Cu^{3+}), $(\text{Bi}^{3+}, \text{Bi}^{5+})$. Відповідно, наявність зазначених іонів дозволяє легко змінювати ступінь окислення описуваних речовин. При цьому існує чітка кореляція між температурою переходу речовини до надпровідного стану T_c і концентрацією іонів кисню.

2) Всі метал-оксиди в надпровідному стані характеризуються наявністю певної частки високочастотних фононів (оптична мода), що зумовлює збільшення температури Дебая цих сполук до величини $\approx 10^3$ К. Це зумовлено специфічною кристалографічною будовою метал-оксидів, що описується орторомбічною елементарною коміркою. Відмінною особливістю цієї структури є те, що вона має шаруватий характер і містить дві конфігурації кисневого оточення іонів міді: чотиригранну піраміду в площинах CuO_2 і ромб, що складається з ланцюжків CuO в базовій площині. Утворюється структура, що складається з так званих "перовскито-подібних" блоків, що містять площини CuO_2 , розділені відокремленими площинами, утвореними ланцюжками CuO . Саме ця обставина зумовлює зближення іонів між площинами і відповідно збільшення максимального значення частоти у фононному спектрі.

3) Перехід до надпровідного стану метал-оксидних сполук за звичайних умов реалізується за відносно низьких значень щільності енергетичних станів електронів поблизу рівня Фермі: $N(E_F) \approx (10^{26} - 10^{27}) \text{ 1/м}^3$. При цьому зони провідності цих речовин характеризуються досить широким інтервалом значень $\approx (3 - 10) \text{ eV}$.

4) Усі надпровідні метал-оксидні сполуки характеризуються температурою $T^* \geq T_c$, за досягнення якої починається відхилення від "нормальної" провідності (температура відкриття так званої "псевдо-щільності" в енергетичному спектрі електронів). При цьому значення температури T^* істотно залежить від величини параметра x , що характеризує ступінь наповнення метал-оксидної сполуки іонами кисню.

5) При переході до надпровідного стану при $T \leq T_c$ всі метал-оксиди характеризуються появою в енергетичному спектрі електронної підсистеми доволі вузької $\approx (5 \times 10^{-3} - 10^{-2}) \text{ eV}$ енергетичної щільності поблизу рівня Фермі.

Найбільш прийнятна фізична концепція, що пояснює практично всі перелічені вище особливості надпровідності метал-оксидних сполук, це ідея про те, що в обговорюваних речовинах формуються специфічні скупчення комплексів іонів (негативні U-центри), що складаються з певного набору іонів (див. рис. 1) [6].

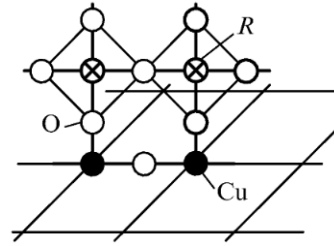


Рис. 1. Фрагмент кристалічної структури $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, що містить кластер $\text{Cu}_2\text{R}_2\text{O}_{8n}$, де іони Cu "вбудовані" в CuO_2 -площину, а іон $\text{R} = \text{Cu}$ в ланцюжках CuO_3 .

Fig. 1. Fragment of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ crystal structure containing a $\text{Cu}_2\text{R}_2\text{O}_{8n}$ cluster, where Cu ions are "embedded" into the CuO_2 plane, and the $\text{R} = \text{Cu}$ ions in the CuO_3 chains.

Кожен U-центр складається з двох іонів міді (катионів), вбудованих у площину CuO_2 та оточуючих їх негативних іонів кисню (аніонів), а також з двох іонів міді, вбудованих у площині, утворені ланцюжками CuO . Формування скупчень такого роду центрів у полікомпонентних метал-оксидних сполуках було підтверджено експериментально. Детальний аналіз енергетичного спектру електронів, що формується в цих речовинах показав, що в ньому виникають рівні, що допускають локальний парний перехід електронів від іону кисню до двох сусідніх іонів міді (рис. 2).

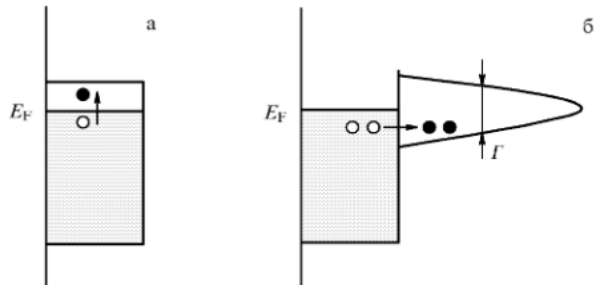


Рис. 2. Схема зонної структури електронного енергетичного спектра: а) звичайного металу; б) метал-оксидної сполуки [15]. Дірки виникають у заповненій зоні за рахунок переходу електронних пар на парний рівень, ширина якого $\Gamma \sim T$.

Fig. 2. Diagram of the band structure of the electronic energy spectrum: a) ordinary metal; b) metal-oxide compound [15]. Holes appear in the filled zone due to the transition of electron pairs to a pair level, the width of which $\Gamma \sim T$.

При цьому на початковій стадії процесу формування енергетичного спектра поява навіть невеликої кількості скупчень U-центрів (кластерів) зумовлює незначну надлишкову електричну

провідність при температурі T^* (температура відкриття «псевдо-щілини»). Мінімальний розмір кластера, що обумовлює можливість парного переходу електронів на вищий енергетичний рівень, визначається довжиною когерентності в площинах CuO_2 і становить $\approx 10^{-9}$ м. У міру збільшення концентрації іонів кисню в метал-оксиді, тобто за зменшенням параметра x ($x \rightarrow 0$), сумарна довжина кластерів, що складаються з негативних U-центрів, збільшується, а температура T^* поступово зменшується, наближаючись до температури переходу T_c . Таким чином, температура переходу метал-оксидних сполук у надпровідний стан T_c визначається повним заповненням аніонної підгратки іонами кисню, тобто за досягнення максимальної можливої сумарної довжини кластерів, утворених U-центрами. Переконалим підтвердженням на користь правомірності зробленого висновку є такий експериментальний факт.

Як зазначалося, складніші метал-оксидні сполуки, що містять додаткові іони Bi, Tl, Hg характеризуються найбільш високими значеннями температури переходу T_c порівняно з більш простими метал-оксидами. Виходячи з викладеної вище логіки, це пояснюється тим, що в структурі цих сполук є додаткова кількість площин CuO_2 , наявність яких зумовлює утворення більшої кількості кластерів, що складаються з U-центрів, порівняно з більш простими оксидами металу. Відповідно, ці сполуки характеризуються вищими значеннями T_c . Фактом, що свідчить на користь наведеної вище схеми, є результат роботи [11], в якій показано, що збільшення сумарної довжини кластерів в умовах дії зовнішнього тиску призводить до підвищення температури переходу T_c .

Таким чином, з великим ступенем впевненості можна зробити висновок, що визначальну роль у процесі появи надпровідного стану в метал-оксидних сполуках грає наявність у їх структурі базисних площин, сформованих CuO_2 , розділених відокремленими площинами, утвореними ланцюжками CuO. Така кристалографічна будова метал-оксидів, а також наявність хімічних зв'язків однойменних пар іонів, що відрізняються, зумовлюють появу скупчень специфічних комплексів іонів (негативних U-центрів), здатних генерувати спарені електрони, що і обумовлює електричну надпровідність цих речовин.

ЗБІЛЬШЕННЯ ТЕМПЕРАТУРИ ПЕРЕХОДУ МЕТАЛ-ОКСИДІВ У НАДПРОВІДНИЙ СТАН В УМОВАХ ОПРОМІНЮВАННЯ ФОТОНАМИ

Відповідно до висновку, зробленого в попередньому розділі, природно припустити, що перехід метал-оксидних сполук до надпровідного

стану може відбуватися за більш високої температури, якщо їх опромінювати досить потужним потоком фотонів. Дійсно, процес формування специфічного енергетичного спектру електронів у метал-оксидах пов'язаний з можливістю утворення іонного і ковалентного хімічних зв'язків між однойменними парами іонів. Реалізація цього процесу може бути суттєво полегшена в умовах опромінювання фотонами [12]. Як уже зазначалося, у звичайних умовах (без опромінення) перші ознаки утворення кластерів з U-центрів виявляються при температурі T^* (температура відкриття «псевдо-щілини»), яка значно перевищує температуру переходу T_c . Очевидно, що опромінення фотонами може значно прискорити процес утворення U-центрів та формування їх скупчень. При цьому теплове руйнування скупчень блокуватиметься процесом їхнього утворення під дією опромінення. Відповідно, при цьому температура переходу T_c має наближатися до значення температури T^* . Зробимо оцінку деяких параметрів потоку фотонів, під впливом якого можна реалізувати цей ефект. Насамперед, очевидно, що величина енергії фотона має задовольняти таку умову: $h\nu \geq W$ (h – константа Планка, ν – частота фотона, W – енергія фотоіндукованої хімічної реакції, що зумовлює утворення негативного U-центру. В даному випадку мінімальне значення енергії W визначається величиною теплової енергії, достатньої для ліквідації бозонів (руйнування спарених електронів), відповідальних за надпровідність, тобто $W \approx kT_c$ (k – константа Больцмана). Оскільки для метал-оксидів величина $T_c \approx 100$ К, то мінімальна довжина хвилі L фотонів, які можуть реалізувати описуваний ефект, має характеризуватися значенням $L \approx 10^{-4}$ м. Фотони такої довжини хвилі відповідають інфрачервоному світловому випромінюванню, потік достатньої потужності якого легко досягається лазерною технологією. Очевидно, що в даному випадку необхідно, щоб густина фотонів відповідала густині атомів речовини, що опромінюється, тобто $n_f \approx n_{at} \approx 10^{29}$ 1/м³. Така густина фотонів досягається при використанні лазера потужністю $\approx 10^{11}$ Вт/м² та тривалістю імпульсу $\approx 10^{-8}$ с. При цьому необхідно мати на увазі, що інфрачервоне випромінювання проникає в об'єм метал-оксидних сполук на глибину $\approx 10^{-6}$ м. Отже, описуваний ефект може реалізуватися або в приповерхневому шарі зразка, що опромінюється, або в об'ємі плівки зазначеної товщини. Крім того, повною мірою цей ефект має проявлятися в монокристалах, оскільки наявність зерен з характерним розміром $\approx (10^{-4} - 10^{-5})$ м обумовлює значне розсіювання інфрачервоного випромінювання.

ВИСНОВКИ

Лазерне опромінювання, що характеризується довжиною хвилі $L \leq 10^{-4}$ м та тривалістю імпульсу $\approx 10^{-8}$ с за досягнення густини потужності $\approx 10^{11}$ Вт/м² може зумовити утворення у метал-оксидних сполуках додаткову кількість специфічних комплексів іонів (негативних U-центрів).

Утворення скупчень негативних U-центрів (кластерів) призводить до формування особливого енергетичного спектра електронної підсистеми метал-оксидів, що допускає парні переходи електронів.

Поява кластерів U-центрів, розмір яких досягає довжини когерентності електронів ($\approx 10^{-9}$ м) обумовлює формування «куперівських» пар електронів (бозонів), здатних переносити електричний заряд без втрати енергії. При цьому виявляються перші ознаки появи надпровідного стану метал-оксидів: зменшення електричного опору при температурі T^* (температура відкриття псевдощільності в енергетичному спектрі електронів). У звичайних умовах (без опромінювання) середнє значення температури T^* для метал-оксидів характеризується величиною ≈ 300 К і залежить від рівня насичення киснем (значення параметра x).

В умовах опромінювання фотонами в метал-оксидах інтенсифікується процес формування максимально можливої сумарної довжини кластерів з U-центрів і, відповідно, температура повного переходу цих сполук до надпровідного стану T_c може наближатися до значення T^* .

Описаний ефект може реалізуватися в приповерхневому шарі завтовшки $\approx 10^{-6}$ м об'ємних монокристалічних зразків метал-оксидів або в тонких плівках такої самої товщини.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори повідомляють про відсутність конфлікту інтересів.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

REFERENCES

1. J. G. Bednorz, K. A. Mueller. Z. Phys., B 64, 189 (1986). <https://doi.org/10.1007/BF01303701>
2. M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu. Phys. Rev. Lett., 58, 908 (1987). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.908>
3. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer. Phys. Rev., 108, 1175 (1957). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>
4. B. Batlogg, B. Batlogg, R. J. Cava, A. Jayaraman, R. B. van Dover, G. A. Kourouklis, S. Sunshine, D. W. Murphy, L. W. Rupp, H. S. Chen, A. White, K. T. Short, A. M. Mjssce, and E. A. Rietman. Phys. Rev. Lett., 58, 2333 (1987). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2333>
5. H. Jaeger, S. Hofmann, G. Kaiser, K. Schulze, G. Petzow. Phys. C, 153, 133 (1988). [https://doi.org/10.1016/0921-4534\(88\)90517-5](https://doi.org/10.1016/0921-4534(88)90517-5)
6. Yu. I. Boyko, V. V. Bogdanov, R.V. Vovk. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series "Physics", 32, 10-13, (2020). <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2020-32-01>
7. P. Strobel, J. Capponi, M. Marezio, P. Monod. Solid State Comm., 64, 513, (1987). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(87\)90770-8](https://doi.org/10.1016/0038-1098(87)90770-8)
8. K. Yvon, M. Francois. Z. Phys., 76, 413 (1989). <https://doi.org/10.1007/BF01307892>
9. Ryusuke Matsunaga, Yuki I. Hamada, Kazumasa Makise, Yoshinori Uzawa, Hirotaka Terai, Zhen Wang, and Ryo Shimano. Phys. Rev. Lett., 111, 057002 (2013). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.057002>
10. Ryusuke Matsunaga, Naoto Tsuji, Hiroyuki Fujita, Arata Sugioka, Kazumasa Makise, Yoshinori Uzawa, Hirotaka Terai, Zhen Wang, Hideo Aoki, and Ryo Shimano. Science, 345, 1145 (2014). <https://doi.org/10.1126/science.1254697>
11. Y. Boyko, V. Bogdanov, R. Vovk, B. Grinev. Low. Temp. Phys., 44, 63 (2018). <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2021-34-03>
12. D. Fausti, R. I. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. C. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, and A. Cavalleri. Science, 331, 189 (2011). <https://doi.org/10.1126/science.1197294>

PHOTON IRRADIATION AND "HIGH-TEMPERATURE" ELECTRICAL SUPERCONDUCTIVITY OF POLYCOMPONENT METAL-OXIDE COMPOUNDS

Yu. I. Boyko¹, V. V. Bogdanov¹, R. V. Vovk¹, B. V. Grinyov²

¹*V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody sq., 61022 Kharkiv, Ukraine*

²*Institute for Scintillation Materials, STC "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, 60 Nauky Ave., 61072 Kharkiv, Ukraine*

E-mail: bogdanov@karazin.ua

Received on March 27, 2024. Reviewed on May 06, 2024.

Accepted for publication on May 15, 2024.

The paper discusses the possibility of increasing the transition temperature of metal-oxide compounds ("high-temperature" superconductors) to the superconducting state (zero electrical resistance) when irradiating them with a sufficiently powerful photon flow. In this case, in the irradiated substance, as a result of internal photo-ionization, changes occur in both the important parameters of the phonon spectrum and the electrons energy spectrum.

The value of the photon energy must satisfy this condition: $h\nu \geq W$ (ν is the photon frequency, W is the energy of the photoinduced chemical reaction. According to the estimates made in the work, the minimum wavelength of photons that can realize the described effect should be characterized by the value $\lambda \approx 10^{-4}$ m. Photons of this wavelength correspond to infrared light radiation, a flow of sufficient power of which is easily achieved by laser technology.

A change in the parameters of the phonon spectrum and the energy state of electrons in the discussed compounds when they are irradiated with photons causes the formation of an additional number of clusters of special ion complexes (negative U-centers), which are capable of generating quasiparticles: "Cooper" pairs of electrons (bosons).

The formation of clusters of negative U-centers leads to the formation of a special energy spectrum of the electronic subsystem in metal oxides, which allows pair transitions of electrons. Paired electrons carry an electric charge without losing energy. Irradiation of multicomponent metal oxides with optical photons intensifies the process of formation of the maximum possible total length of U-centers clusters, therefore intensifies the process of metal oxides transition to a superconducting state: the temperature of the complete transition of these compounds to the superconducting state T_c can approach the value of the temperature of the opening of a pseudogap in the energy spectrum of electrons that is, this transition is realized at higher temperatures than it occurs under normal conditions.

Keywords: *high-temperature superconductivity, metal-oxide compounds, negative U-centers, photoionization.*

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-05>

UDC: 53.092+538.911+538.945

PACS numbers: 74.25.Fy, 74.40.+k, 74.62.Fj

ВПЛИВ ВИСОКОГО ТИСКУ НА ТЕМПЕРАТУРНУ ЗАЛЕЖНІСТЬ ПСЕВДОЩІЛИНИ МОНОКРИСТАЛІВ $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$

Г. Я. Хаджай¹ , В. Ф. Коршак¹ , С. В. Савич¹, Джуны́ Ду^{1,2}, Р. В. Вовк¹ 

¹Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

²Школа математичних наук Лоянського педагогічного університету, 471934 Лоян, Китай

E-mail: rvvovk2017@gmail.com

Надійшла до редакції 17 квітня 2024 р. Переглянуто 22 травня 2024 р.

Прийнято до друку 25 травня 2024 р.

У роботі було досліджено вплив високого гідростатичного тиску на електричну провідність $\sigma(T)$ у базисній ab -площині монокристалу високотемпературного надпровідника (ВТНП) $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$. Монокристал $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ вирощували за відомою розчин-розплавною технологією. Як початкові компоненти для вирощування монокристалу $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ використовували сполуки Y_2O_3 , $BaCO_3$, CuO та Pr_2O_3 у відповідному процентному співвідношенні. Режим вирощування та насичення киснем кристалу $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ були такими ж, як і для нелегованих монокристалів. Електричний опір у ab -площині вимірювали за стандартною 4-контактною методикою. Гідростатичний тиск створювали у мультиплікаторі типу поршень-циліндр. Експериментально отримано температурні залежності питомого електричного опору $\rho(T)$ досліджуваних монокристалів в ab -площині в інтервалі температур T_c –300 К за тисків 0–10 кбар. При всіх тисках, які були застосовані, експериментальні криві $\rho(T)$ містять лінійні ділянки при температурах $T > T^*$. При температурах $T < T^*$ криві $\rho(T)$ відхиляються донизу від своєї лінійної екстраполяції, тобто у досліджених зразках виникає надлишкова провідність $\Delta\sigma(T)$. Встановлено, що $\Delta\sigma(T)$ зразків у широкому інтервалі температур $T_f < T < T^*$ характеризується експоненційною температурною залежністю $\Delta\sigma \sim (1 - T/T^*) \exp(\Delta^*_{ab}/T)$, де T^* – середньопольова температура надпровідного переходу, яка може бути інтерпретована в термінах теорії кросовера БКШ–БЕК. Користуючись цим співвідношенням, побудовано температурну залежність псевдощілини $\Delta^*_{ab}(T)$ від T^* до температур, що відповідають максимальному значенню псевдощілини. Збільшення прикладеного тиску приводить до ефекту звуження температурного інтервалу реалізації псевдощілинного (ПЩ) режиму і, в результаті, до розширення інтервалу лінійної залежності питомого електричного опору у ab -площині. При збільшенні тиску температурна залежність псевдощілини демонструє кросовер від залежності типу БКШ до залежності типу БЕК.

Ключові слова: надлишкова провідність, допущання, монокристали $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, високотемпературна надпровідність, кросовер, псевдощілинний стан.

Як цитувати: Г. Я. Хаджай, В. Ф. Коршак, С. В. Савич, Джуны́ Ду, Р. В. Вовк. Вплив високого тиску на температурну залежність псевдощілини монокристалів $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$. Вісник ХНУ імені В. Н. Каразіна. Серія «Фізика». Вип. 40, 2024, 47–51. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-05>

In cites: G. Ya. Hadzhai, V. F. Korshak, S. V. Savich, Junyi Du, R. V. Vovk. Effect of high pressure on temperature dependence of pseudogap in $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 47–51. <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-05> (in Ukrainian).

ВСТУП

Як відомо, допування сполуки YBaCuO елементами, що заміщують, викликає зміну густини носіїв струму, тепло- та електропровідності цього надпровідника. Водночас важливу роль відіграють тип та концентрація домішки. Особливий інтерес, у цьому аспекті, становить часткова заміна Y на Pr , яка, з одного боку, приводить до пригнічення надпровідності (на відміну від випадків заміни Y на решту рідкоземельних елементів) [1, 2], а з іншого – дозволяє зберігати практично незмінними параметри ґратки [3] та кисневий індекс δ [2]. Зокрема, дослідження впливу домішок Pr на умови та режими існування області псевдоцілинного стану таких сполук [1] відіграє важливу роль не тільки для прояснення природи високотемпературної надпровідності, але й для визначення емпіричних шляхів підвищення їх критичних параметрів. Слід зазначити, що дотепер дані про ступінь впливу допування Pr на ПЩ-стан сполуки YBaCuO залишаються значною мірою суперечливими. Очевидно, певну роль тут відіграє той факт, що істотна частина експериментального матеріалу була отримана на керамічних, плівкових чи текстурованих зразках різної технологічної передісторії [1–3], що мають високий вміст міжгранулярних зв'язків. Як було показано в роботі [4], за достатньо високої точності вимірювань область псевдоцілини в широкому інтервалі температур можна визначити із залежностей $\rho(T)$ (електроопір у базисній площині) при температурах, нижчих за деяке характерне значення T^* (температури відкриття псевдоцілини). У цій роботі було досліджено вплив домішок Pr ($x \approx 0.34$) на температурну залежність псевдоцілини в монокристалах $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ з різною критичною температурою (T_c) в умовах прикладання високого гідростатичного тиску до 10 кбар.

МАТЕРІАЛИ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ МЕТОДИКИ

Монокристали $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ вирощували за розчин-розплавною технологією [1]. Для отримання кристалів з частковою заміною Y на Pr , $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, у початкову шихту додавали Pr_2O_3 у відповідному процентному співвідношенні. Режимом вирощування і насичення киснем кристалів $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ були такими ж, як і для нелегованих монокристалів [1]. Як початкові компоненти для вирощування кристалів використовували сполуки Y_2O_3 , BaCO_3 , CuO і Pr_2O_3 . Електроопір у ab -площині вимірювали за стандартною 4-контактною методикою шляхом нанесення срібної пасти на поверхню кристала з наступними приєднанням срібних провідників діаметром 0.05 мм і тригодинним відпадом при температурі 200 °С в

атмосфері кисню. Така процедура дозволяла отримати перехідний опір контактів менше одного Ома та проводити резистивні вимірювання при транспортних струмах до 10 мА в ab -площині. Гідростатичний тиск створювали у мультиплікаторі типу поршень-циліндр [1]. Величину тиску визначали за допомогою манганінового манометра, температуру – мідь-константанової термопари, вмонтованої у зовнішню поверхню камери на рівні положення зразка.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Температурні залежності питомого електроопору у ab -площині $\rho(T)$ кристалів $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ наведено на рис. 1.

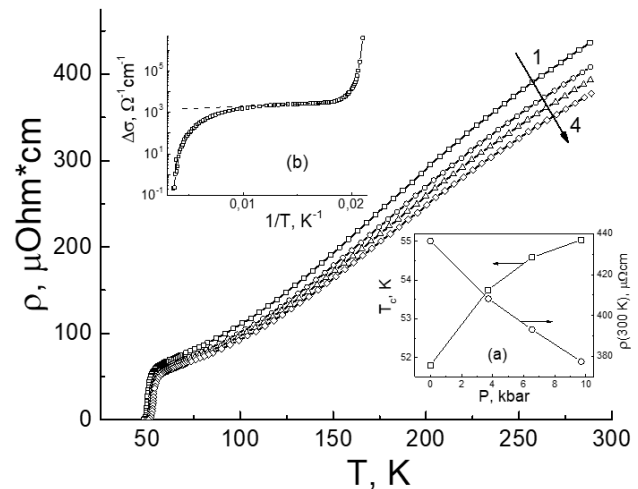


Рис. 1. Температурні залежності питомого електричного опору в базисній площині $\rho(T)$ монокристалу $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, виміряні за тисків: 0; 3.72; 6.53; 9.7 кбар – криві 1–4 відповідно. Вставка (а): баричні залежності T_c (квадрати) та $\rho(300 \text{ K})$ (кола) монокристала $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Вставка (б): температурна залежність надлишкової провідності $\Delta\sigma(T)$ монокристала за атмосферного тиску.

Fig. 1. Temperature dependences of the resistivity in the base plane, $\rho(T)$, of the $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystal, measured at pressures: 0; 3.72; 6.53; 9.7 kbar – curves 1–4, respectively. Inset (a): Baric dependences of T_c (squares) and $\rho(300 \text{ K})$ (circles) of the $\text{Y}_{0.66}\text{Pr}_{0.34}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystal. Inset (b): Temperature dependence of the excess electrical conductivity $\Delta\sigma(T)$ of this single crystal at atmospheric pressure.

Видно, що, в міру зростання прикладеного тиску, електроопір зразків зменшується, а критична температура зростає, що узгоджується з літературними

даними [2]. Водночас слід зазначити, що всім залежностям $\rho(T)$ властива наявність ділянки з характерним термоактиваційним прогином.

Як видно з рис. 1, при зниженні температури менше певного характерного значення T^* відбувається відхилення $\rho(T)$ від лінійної залежності, що свідчить про появу деякої надлишкової провідності, яка, як вже наголошувалося вище, зумовлена переходом до псевдощілинного режиму [1]. Водночас, у міру зростання прикладеного тиску, інтервал лінійної залежності $\rho(T)$ істотно звужується, а температура T^* зміщується в область низьких температур. Це також свідчить про відповідне звуження температурного інтервалу існування надлишкової провідності.

Температурна залежність надлишкової провідності зазвичай визначається з рівності:

$$\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0, \quad (1)$$

де $\sigma_0 = \rho_0^{-1} = (A + BT)^{-1}$ – провідність, що визначається екстраполяцією лінійної ділянки у нульове значення температури, а $\sigma = \rho^{-1}$ – експериментальне значення провідності у нормальному стані. Як показав аналіз, у достатньо широкому температурному інтервалі ці криві добре описуються експоненційною залежністю вигляду:

$$\Delta\sigma \sim \exp(\Delta^*_{ab}/T), \quad (2)$$

де Δ^*_{ab} – величина, що визначає деякий термоактиваційний процес, пов'язаний з утворенням «псевдощілини».

Експоненційна залежність $\Delta\sigma(T)$ вже спостерігалася раніше на плівкових зразках $YBaCuO$ [4]. Як було показано в [4], апроксимація експериментальних даних може бути істотно розширена за допомогою введення співмножника $(1 - T/T^*)$. У цьому випадку надлишкова провідність виявляється пропорційною густині надпровідних носіїв $n_s \sim (1 - T/T^*)$ та обернено пропорційною числу пар, $\sim \exp(-\Delta^*/kT)$, зруйнованих тепловим рухом:

$$\Delta\sigma \sim (1 - T/T^*) \exp(\Delta^*_{ab}/T). \quad (3)$$

При цьому T^* розглядається як середньопольова температура надпровідного переходу, а температурний інтервал $T_c < T < T^*$, у якому існує псевдощілинний стан, визначається жорсткістю фази параметра порядку, що також залежить від дефіциту кисню або концентрації допуючого елемента. Таким

чином, використовуючи методику, запропоновану в [4], за експериментальною кривою $\ln\Delta\sigma$ можна побудувати температурну залежність $\Delta^*_{ab}(T)$ безпосередньо до T^* .

На рис. 2 показано температурні залежності псевдощілини у зведених координатах $\Delta^*(T)/\Delta^*_{\max} - T/T^*$ ($\Delta^*_{\max}$ – значення Δ^* на плато оддалік T^*) за тисків 0 кбар та 9.7 кбар. Пунктирними лініями показано залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані згідно з [5] для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), $-2, -5, -10$ (межа БЕК).

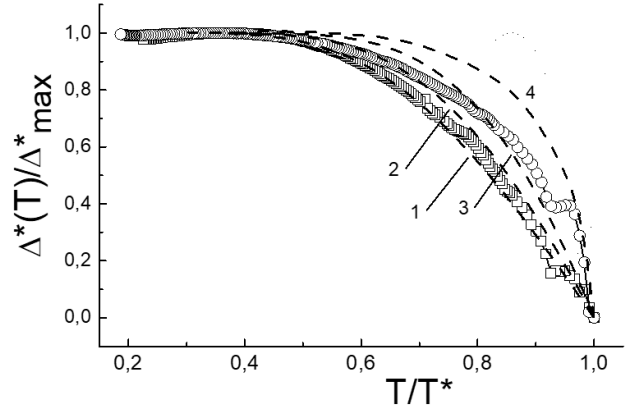


Рис. 2. Температурні залежності псевдощілини кристалу у зведених координатах $\Delta^*(T)/\Delta^*_{\max} - T/T^*$ ($\Delta^*_{\max}$ – значення Δ^* на плато оддалік T^*) за тисків 0 кбар (квадрати) та 9.7 кбар (кола). Пунктирними лініями показано залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані згідно з [5] для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), $-2, -5, -10$ (межа БЕК).

Fig. 2. Temperature dependences of the crystal pseudogap in the relative coordinates $\Delta^*(T)/\Delta^*_{\max} - T/T^*$ ($\Delta^*_{\max}$ – the value of Δ^* on the plateau far from T^*) at pressures of 0 kbar (squares) and 9.7 kbar (circles). Dotted lines show the dependences of $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ on T/T^* , calculated according to [5] for the values of the crossover parameter $\mu/\Delta(0) = 10$ (BCS limit), $-2, -5, -10$ (BEC limit).

Температурні залежності псевдощілини були раніше одержані в роботі [5] в рамках теорії кросовера БКШ–БЕК. У загальному вигляді ці залежності описуються рівнянням:

$$\Delta(T) = \Delta(0) - \Delta(0) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{T}{\Delta(0)}} \times \exp\left[-\frac{\Delta(0)}{T}\right] \left[1 + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{x_0^2 + 1 - 1}{T/\Delta(0)}}\right)\right] \quad (4)$$

де $x_0 = \mu/\Delta(0)$ (μ – хімпотенціал системи носіїв; $\Delta(0)$ – величина енергетичної щілини при $T = 0$), а $\operatorname{erf}(x)$ – функція похибок.

У граничному випадку $x_0 \rightarrow \infty$ (слабкого спаровування) аналітичний вираз (4) набуває вигляду:

$$\Delta(T) = \Delta(0) - \Delta(0)\sqrt{2\pi\Delta(0)T} \exp\left[-\frac{\Delta(0)}{T}\right], \quad (5)$$

добре відомого у теорії БКШ. Водночас для межі сильних взаємодій у 3-вимірному випадку ($x_0 < -1$) формула (4) переходить у:

$$\Delta(T) = \Delta(0) - \frac{8}{\sqrt{\pi}} \sqrt{-x_0} \left(\frac{\Delta(0)}{T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2(0)}}{T}\right]. \quad (6)$$

Залежності $\Delta^*(T)/\Delta(0)$ від T/T^* , розраховані згідно з (6) для значень параметра кросовера $\mu/\Delta(0) = 10$ (межа БКШ), -2 , -5 , -10 (межа БЕК), показано на рис. 2 пунктирними лініями. Видно, що, у міру зростання величини прикладеного тиску, відбувається зміщення експериментальних кривих від залежностей вигляду (6) до (5). Така поведінка виявляється якісно подібною до ефекту трансформації температурних залежностей псевдощілини зразків YBaCuO , що спостерігається при зниженні ступеня кисневої нестехіометрії [1]. Очевидно, що згадані кореляції в поведінці кривих $\Delta^*(T)$ не є випадковими. Дійсно, як добре відомо з літератури (див., наприклад, [1]), прикладання високого тиску до зразків ВТНП-системи 1-2-3, рівно як і зменшення вмісту кисню, приводить до поліпшення провідних характеристик, яке виражається у збільшенні абсолютної величини T_c та істотному зниженні питомого електроопору. Таким чином, враховуючи деяку умовність визначення величини температури відкриття псевдощілини T^* по відхиленню залежності $\rho(T)$ від лінійної, узгодження експерименту з теорією в нашому випадку можна вважати цілком задовільним.

ВИСНОВКИ

Результати проведеного дослідження свідчать про таке.

Прикладання високого тиску до монокристалів $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($x \approx 0.34$) приводить до істотного розширення інтервалу лінійної залежності $\Delta^*_{ab}(T)$ та звуження температурної ділянки реалізації псевдощілинного режиму.

Надлишкова провідність $\Delta\sigma(T)$ монокристалів $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ у широкому інтервалі температур $T_f < T < T^*$ характеризується експоненційною температурною залежністю, а температура

залежність псевдощілини задовільно описується в рамках теорії кросовера БКШ–БЕК.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори повідомляють про відсутність конфлікту інтересів.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. R. V. Vovk, A. L. Solovyov. Low Temp. Phys., 44, 81 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5020905>
2. M. Akhavan. Physica B, 321, 265 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(02\)00860-8](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(02)00860-8)
3. A. I. Chronos, I. L. Goulatis and R. V. Vovk. Acta Chim. Slov., 54, 179 (2007).
4. Д. Д. Прокоф'єв, М. П. Волков, Ю. А. Бойков. ФТТ, 45, 7, 1168 (2003).
5. E. Babaev, H. Kleinert. Phys. Rev. B., 59, 12083 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12083>

REFERENCES

1. R. V. Vovk, A. L. Solovyov. Low Temp. Phys., 44, 81 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5020905>
2. M. Akhavan. Physica B, 321, 265 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(02\)00860-8](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(02)00860-8)
3. A. I. Chronos, I. L. Goulatis and R. V. Vovk. Acta Chim. Slov., 54, 179 (2007).
4. D. D. Prokof'ev, M. P. Volkov, Yu. A. Boykov. Physics of the Solid State, 45, 7, 1168 (2003) (in Russian).
5. E. Babaev, H. Kleinert. Phys. Rev. B., 59, 12083 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12083>

EFFECT OF HIGH PRESSURE ON TEMPERATURE DEPENDENCE OF PSEUDOGAP IN $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTALS

G. Ya. Hadzhai¹, V. F. Korshak¹, S. V. Savich¹, Junyi Du^{1,2}, R. V. Vovk¹

¹V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine

²School of Mathematical Sciences, Luoyang Normal University, 471934 Luoyang, China

E-mail: rvvovk2017@gmail.com

Received on April 17, 2024. Reviewed on May 22, 2024.

Accepted for publication on May 25, 2024.

The paper investigates the effect of high hydrostatic pressure on the conductivity, $\sigma(T)$, in the basic ab -plane of the HTSC single crystal $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$. The $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal was grown using the well-known solution-melt technology. Y_2O_3 , $BaCO_3$, CuO and Pr_2O_3 compounds were used in the appropriate percentage ratio as initial components for growing $Y_{0.66}Pr_{0.34}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystal. The modes of growth and oxygen saturation of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ crystal were the same as for undoped single crystals. Electrical resistance in the ab -plane was measured according to the standard 4-pin method. Hydrostatic pressure was created in a piston-cylinder multiplier. The temperature dependences of the specific electrical resistance, $\rho(T)$, of the studied single crystals in the ab -plane in the temperature range T_c –300 K at pressures of 0–10 kbar were obtained experimentally. At all applied pressures, the experimental curves $\rho(T)$ contain linear sections at temperatures $T > T^*$. When $T < T^*$, the $\rho(T)$ curves deviate downward from their linear extrapolation, i.e., excess conductivity, $\Delta\sigma(T)$, appears in the studied samples. It was established that $\Delta\sigma(T)$ of the samples in a wide temperature range $T_f < T < T^*$ are characterized by an exponential temperature dependence $\Delta\sigma \sim (1 - T/T^*)\exp(\Delta^*_{ab}/T)$, where T^* is the mean-field temperature of the superconducting transition, and can be interpreted in terms of the BCS-BEC crossover theory. Using this ratio, the temperature dependence of the pseudogap, $\Delta^*_{ab}(T)$, from T^* to the temperatures corresponding to the maximum value of the pseudogap was constructed. An increase in the applied pressure leads to the effect of narrowing the temperature interval of realization of the pseudogap (PG) mode and, as a result, to the expansion of the interval of the linear dependence of the specific electrical resistance in the ab -plane. As the pressure increases, the temperature dependence of the pseudogap shows a crossover from the dependence of the BCS type to the dependence of the BEK type.

Keywords: excess conductivity, doping, $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals, high temperature superconductivity, crossover, pseudogap state.

Original article

In print article

<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-06>

UDC: 378.016:53, 37.018.43, 37.091.26

PACS numbers: 01.40.-d, 01.40.Fk, 01.40.gb

PECULIARITIES OF TEACHING PHYSICS AND ASTRONOMY AT THE FACULTY OF PHYSICS IN THE CONDITIONS OF DISTANCE LEARNING

M. O. Makarovsky , O. M. Savchenko 

V.N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine

E-mail: nik.makarovsky@gmail.com

Received on April 03, 2024. Reviewed on May 11, 2024.

Accepted for publication on May 17, 2024.

Development of high quality teaching remotely is currently at the forefront of higher education developments. Particularly challenging is remote delivery of the teaching programs that require deep understanding of complex scientific phenomena, as well as development of practical skills and professional competencies. In this work, we discuss the experience of remote delivery of Physics degree. It is noted that different approaches are needed for different teaching elements. Based on this, we make recommendations for approaches to enhance student experience and to enable successful completion of the degree programs.

Remote defense of the diploma projects in the format of research conference (using Zoom, Skype, GoogleMeet and other video communication) showed that this stage of the educational process is successfully implemented and is almost identical to the face-to-face defense. Consultations (on training courses, research projects, diploma projects) can be conducted remotely.

When conducting written assessments of learning: tests, quizzes and examinations in the distance mode (using standard procedures such as distribution of questions and tasks), it is quite difficult to control the quality of students' performance, since there are opportunities for use various sources of information. A test system can provide a suitable substitute.

The experience of conducting lectures and practical classes in the distance mode has shown that the lecturer does not have the feedback that occurs in classroom teaching. The lecturer is unable to interact with the audience, since students hardly ask questions and during the lecture they can go about their own business rather than listen to the lecturer.

Key words: *distance learning, creative skills, scientific work of students, problem-based learning.*

In cites: *M. O. Makarovsky, O. M. Savchenko. Peculiarities of teaching physics and astronomy at the faculty of physics in the conditions of distance learning. Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Physics. Iss. 40, 2024, 52–55.*
<https://doi.org/10.26565/2222-5617-2023-40-06>

INTRODUCTION

Over the past two years of martial law, we have gained considerable experience in working with students via remote access. Delivering distance learning under such conditions makes it difficult to work with students on the quality of specialist training. One could complain about the insufficient material base, however reports from colleagues from well-known European and US universities that do not have such problems, have indicated challenges in delivering the quality of training in distance learning [1, 2]. What is the reason for this situation?

EXPERIENCE TEACHING IN DISTANCE LEARNING SETTINGS

Our colleague, a lecturer at Vinnitsa University, expressed an interesting opinion: 'Distance learning is a great option for those who want to continue their studies but cannot attend classes on a regular basis. However, distance learning is not the right choice for everyone - it is best suited to those who are self-disciplined and self-motivated' [3]. At the same time, the Law of Ukraine on Higher Education [4] and the relevant standard of Bachelor's degree in Physics and Astronomy [5] set rather high requirements for the quality of education and the level of competencies of a university graduate: 'higher education is a set of systematized knowledge, skills and practical abilities, ways of thinking, and other competencies that are higher in complexity than the level of complete general secondary education'. This implies graduates' ability to 'solve complex specialized tasks and practical problems in physics or astronomy'. It can be seen that there are no 'concessions' or 'discounts' and no references to martial law in these program documents. In this situation, practical experience of working with students can be useful.

During the two years of quarantine related to COVID-19, the Faculty of Physics and Astronomy has gained considerable experience in working with students via remote access in teaching physics and astronomy. With some refinements (for example, the use of the Moodle platform), it has come in handy in today's difficult conditions. We summarize our observations for different types of teaching delivery:

1. Remote defense of the diploma projects in the format of research conference (using Zoom, Skype, GoogleMeet and other video communication) showed that this stage of the educational process is successfully implemented and is almost identical to the face-to-face defense.
2. Consultations (on training courses, research projects, diploma projects) can be conducted remotely.
3. When conducting written assessments of learning: tests, quizzes and examinations in the distance mode (using standard procedures such as distribution of questions and tasks), it is quite difficult to control the quality of students' performance, since there are opportunities for use various

sources of information. A test system can provide a suitable substitute.

4. The experience of conducting lectures and practical classes in the distance mode has shown that the lecturer does not have the feedback that occurs in classroom teaching. The lecturer is unable to interact with the audience, since students hardly ask questions and during the lecture they can go about their own business rather than listen to the lecturer.

Based on our experience in delivering remote teaching, we found a number of approaches that allow successful completion of teaching and training as well and possible route to stimulate students' engagement.

The types of educational process that either require individual work of the lecturer with one student (e.g. preparation and defense of diploma projects) or do not require long-term systematic work with a large student group (e.g. lectures on special courses and seminars) can be conducted quite successfully in the distance mode. In other words, forms of education that involve an active oral on-line dialogue, such as individual interviews and small group teaching, are more successful.

In term of assessments, significant changes are needed, as traditional assignments used for in class examination are unsuitable. On-line timed assessments, such as tests and multiple-choice tests, provide a suitable alternative, and a means to examine fundamental knowledge and understanding of a specific subject. Development of problem solving skills is one of the key requirements for higher education degree programs. Problem based learning practices are successfully used for various degree programs from sciences to medicine [6]. We recommend that this approach to the student assessment can be very productive in the remote teaching mode, as it requires application of fundamental knowledge, and can stimulate deep learning and critical thinking.

Online resources are shared with the students to provide them with key information needed to develop deep understanding of the subject. At the time when vast amount of information is available in open access, undirected independent learning can be overwhelming for student, and can result is patchy knowledge of the subject. Careful selection of these resources can support quality of student learning and enhance their experience.

DEVELOPMENT OF PROFESSIONAL SKILLS

Development of professional skills remotely is challenging, as there is limited opportunity for students to practice their knowledge in professional setting. Individual online learning can hinder the development of professional skills, such as communication skills and team work. More attention should be paid not only to the rights but also to the responsibilities of university students, supporting the development of soft skills, such as self-discipline and self-

motivation. It is recommended that at the beginning of the academic year, during the first two weeks of study, students (especially freshmen) have tutorials with their supervisors to discuss the university internal regulations, student responsibilities, communication ethics (including email ethics), academic integrity, and the traditions of our university. With good understanding and compliance with these, high quality teaching and learning can be successfully delivered in remote mode.

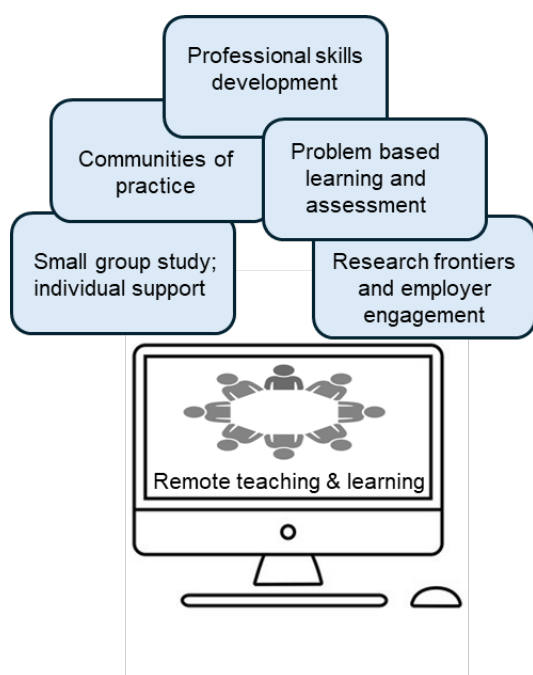


Fig. 1. Schematic diagram of recommendations for teaching and learning delivery in the remote mode.

Communities of practice and study groups are widely recognized to be beneficial for student motivation, self-directed learning and professional development [7, 8]. Hence in the remote teaching context, it is important to create opportunities for peer-to-peer learning and support, as well as time as space for scientific discussions. Moderated problem based teaching sessions can stimulate group discussions and can be instrumental in establishing supportive learning communities. Selecting topics that appeal to each particular student group, e.g. physics problems related to their interests, hobbies and future career aspirations, will ensure student engagement in the on-line session and will stimulate further group discussion as well as individual exploration of the topic, beyond the context of the taught course.

In supporting further studies, and developing students into life-long learners, particularly beneficial and stimulated are on-line lectures by renown national and international scientists as well as prospective employers on the current global developments in research as well as on

various career path and professional requirements for successful careers.

CONCLUSIONS

We conclude that despite the challenges of remote teaching delivery, high quality education and professional training can be delivered by including small group teaching and individual dialogue, and shifting emphasis to professional skill development and productive engagement with the course.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that they have no conflict of interests.

REFERENCES

1. Nikolai Bjurholt, Maria Vetleseter Bøe. Physics Education, 58, 1, 015004 (2023). <https://doi.org/10.1088/1361-6552/ac96be>
2. M. Chiodaroli, L. Freyhult, A. Solders, D. Tarrío, K. Pia Günter. Higher Education, (2024). <https://doi.org/10.1007/s10734-023-01179-6>
3. I. M. Ushkalenko, Y. S. Zelinska Distance form of learning in higher education institutions of Ukraine and other countries. Effective Economy, No. 4, 2018 www.economy.nayka.com.ua
4. Law of Ukraine 'On Higher Education' No. 1556-VII <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1556-18#Text>
5. Standard of Higher Education of Ukraine, level: Bachelor of Physics and Astronomy. <https://mon.gov.ua/storage/app/media/vishcha-osvita/zatverdzeni%20standarty/2020/11/17/104-fizyka-ta-astronomiya-mahistr.pdf>
6. Online Learning, 21, 1, 209 (2017). <https://files.eric.ed.gov/fulltext/EJ1140262.pdf>
7. M. Bozzi, J. E. Raffaghelli, M. Zani. Educ. Sci., 11, 2, 67 (2021). <https://doi.org/10.3390/educsci11020067>

ОСОБЛИВОСТІ ВИКЛАДАННЯ ФІЗИКИ ТА АСТРОНОМІЇ НА ФІЗИЧНОМУ ФАКУЛЬТЕТІ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ

М. О. Макаровський, О. М. Савченко

*Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна
E-mail: nik.makarovsky@gmail.com*

Надійшла до редакції 03 квітня 2024 р. Переглянуто 11 травня 2024 р.

Прийнято до друку 17 травня 2024 р.

Розвиток високоякісного дистанційного навчання наразі займає перше місце у розвитку вищої освіти. Особливо складним є дистанційне виконання навчальних програм, які вимагають глибокого розуміння складних наукових явищ, а також розвитку практичних навичок і професійних компетенцій. У цій роботі ми обговорюємо досвід дистанційного викладання університетської програми з фізики. Зазначається, що для різних елементів навчання потрібні різні підходи. На основі цього ми робимо рекомендації щодо підходів для покращення досвіду студентів і забезпечення успішного завершення освітніх програм.

Проведення захисту дипломних проектів у дистанційному режимі у форматі наукової конференції (з використанням відео зв'язку Zoom, Skype, GoogleMeet та інших) показало, що цей етап навчального процесу успішно реалізується і майже не відрізняється від очного захисту. Проведення консультацій (з навчальних курсів, курсових робіт, дипломних проектів) цілком може проводитись у дистанційному режимі.

При проведенні письмових контрольних заходів навчання: контрольних робіт, заліків та екзаменів у дистанційному режимі (з використанням стандартних процедур: роздачі питань та задач), достатньо складно проконтролювати якість успішності студентів, оскільки є велика можливість списування з різноманітних джерел. Заміною може бути тестова система.

Досвід проведення лекцій та практичних занять у дистанційному режимі показав, що викладач не має того зворотного зв'язку, котрий виникає при аудиторному навчанні. Викладач не має можливості взаємодіяти з аудиторією, адже студенти майже не задають питань і по ходу лекції можуть займатися своїми нагальними справами, а не слухати лектора.

Keywords: *дистанційне навчання, творчі навички, наукова робота студентів, проблемне навчання*

ІНФОРМАЦІЯ ДЛЯ АВТОРІВ СТАТЕЙ

журналу "Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія "Фізика"

У журналі друкуються статті та стислі за змістом повідомлення, в яких наведені оригінальні результати теоретичних та експериментальних досліджень, а також аналітичні огляди літературних джерел з різноманітних актуальних проблем фізики за тематикою видання.

Мова статей – українська та англійська.

ТЕМАТИКА ЖУРНАЛУ

1. Теоретична фізика.
2. Фізика твердого тіла.
3. Фізика низьких температур.
4. Фізика магнітних явищ.
5. Оптика та спектроскопія.
6. Загальні питання фізики і серед них: методологія та історія фізики, математичні методи фізичних досліджень, методика викладання фізики у вищій школі, техніка та методика фізичного експерименту тощо.

ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ РУКОПИСІВ СТАТЕЙ

Загальний обсяг тексту рукопису статті повинен займати не більше ніж 15 сторінок.

Рукопис статті складається з титульної сторінки, на якій вказані: назва статті, ініціали, прізвища, ORCID, авторів, поштова адреса установи, в якій була виконана робота, класифікаційні індекси за системами PACS та УДК, електронна адреса одного з авторів; анотацій з ключовими словами, викладених українською та англійською мовами (анотація мовою статті розміщується на титульній сторінці, анотація разом з назвою статті, ініціалами та прізвищами авторів, поштовою адресою установи та ключовими словами, викладеними другою мовою, – в кінці рукопису); основного тексту статті, який має бути структурованим; списку літератури з посиланнями на DOI, якщо вони присвоєні; підписів під рисунками; таблиць; рисунків: графіків, фотознімків.

Висновки не повинні повторювати анотацію. Анотація має бути за обсягом не менш ніж 1800 символів. В ній мають бути відображені постановка задачі, методи дослідження, основні наукові результати та висновки.

В україномовних статтях підписи до рисунків і таблиць дублюються англійською мовою. За наявності в тексті кирилических або неангломовних цитувань надаються список літератури і розділ REFERENCES. За їх відсутності – тільки розділ REFERENCES.

При оформленні у REFERENCES кирилических та неангломовних цитувань вказується авторський (офіційний) англійський варіант назви роботи та імен авторів. За його відсутності наводиться переклад англійською мовою (загальноживаний у літературі, якщо він існує). Наприкінці посилання необхідно вказати мову першоджерела, з якого зроблено переклад – наприклад, (In Ukrainian).

ВИМОГИ ДО ЕЛЕКТРОННОГО ВАРІАНТУ РУКОПISY СТАТТІ

Текст рукопису статті має бути набраний у форматі MicrosoftWord, починаючи з версії 2013 у форматі *.docx.

Формат аркуша – A4. Поля: зліва та справа – 2 см, верхнє – 2.5 см, нижнє – 3 см. Шрифти Times New Roman (Сур) та Arial, міжрядковий інтервал – значення множнику 1.1.

Назва та підзаголовки статті набираються великими літерами, крапка в кінці заголовка не ставиться.

Назва статті, автори, назва організації та анотація розташовуються в одну колонку. Основний текст статті розташовується у дві колонки, ширина колонки – 8.25 см, відстань між колонками – 0.5 см. Допускається розташування тексту в одну колонку, якщо в статті великі рисунки, таблиці та багато великих формул.

Рисунки та фотографії мають бути відскановані з досить високою роздільною здатністю (300 DPI – 600 DPI) та вставлені в текст статті. Наявні на рисунках і фотографіях цифри і написи повинні зазначатися мовою основного тексту статті та добре читатися. Усі фізичні величини подаються в одиницях системи СІ і мовою основного тексту статті. Літерні позначення фізичних величин подаються курсивом.

Для запису формул і рівнянь слід використовувати вбудований редактор рівнянь.

Матеріал статті розташовується в наступному порядку:

Номер умовної десяткової класифікації (УДК) та (PACS): розмір шрифту 10 пт, накреслення звичайне,

відступів немає, розташування зліва.

Назва статті: шрифт Arial, розмір 14 пт, накреслення жирне, відступів немає, розташування центроване.

Автори (ініціали, прізвища): шрифт Arial, розмір 13 пт, накреслення звичайне, відступів немає, розташування центроване.

Назви організацій (повна назва організації, місто, країна, електронна адреса Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 9 пт, накреслення курсивний напис, відступів немає, розташування центроване.

Анотація (мовою основного тексту статті): Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 9 пт, накреслення звичайне, відступ першого рядку абзацу 0.75 см, розташування по ширині.

Ключові слова: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 9 пт, накреслення курсивний напис, відступ рядку абзацу 0.75 см, розташування по ширині.

Текст статті: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 10 пт, накреслення звичайне, відступ першого рядку абзацу 0.75 см, розташування по ширині. Слова повинні розділятися тільки одним пропуском. Неприпустимий пропуск після слова перед розділовими знаками. Текст набирається з вживанням тільки знака м'якого переносу (знак переносу в поєднанні з клавішею Ctrl). Між значенням величини та одиницею її виміру ставиться жорсткий пропуск (Ctrl+Shift+пробіл).

Найменування підзаголовків: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 10 пт, накреслення жирне, відступів немає, розташування центроване.

Підпис під рисунком: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 10 пт, накреслення звичайне курсивне, відступи першого та подальших рядків абзацу 0.75 см, розташування центроване.

Формули: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 10 пт, накреслення звичайне, розташування по ширині. Нумерація формул у круглих дужках з правого краю рядка.

Література: Шрифт Times New Roman (Cyr), розмір 9 пт, накреслення звичайне, відступів немає, розташування по ширині. Не допускаються посилання на неопубліковані матеріали. Посилання наводяться мовою оригіналу.

ПРИКЛАД ОФОРМЛЕННЯ СПИСКУ ЛІТЕРАТУРИ:

1. І.П. Пінкевич, В.Й. Сугаков. Теорія твердого тіла, ВПЦ "Київський університет", К. (2006), 333 с.
2. М.В. Гнатенко. УФЖ, 60, 5, 390 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
3. K. Janakiraman, S. Swamiappan. Materials Letters, 357, 135731 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
4. A.D. Ashby. Phys.Rev., A19, 213 (1985). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
5. D.V. Vert. In Progress in Metals, ed. by R. Speer, USA, New York (1976), v.4, p.17. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>

ДО РЕДАКЦІЇ НАДАЮТЬСЯ

1. Два роздруковані примірники рукопису статті, які підписані її авторами.
2. Електронна версія рукопису та дані щодо контактів для спілкування з її авторами. Матеріали слід надіслати електронною поштою на адресу physics.journal@karazin.ua.
3. Направлення від установи, де була виконана робота, і акти експертизи у двох примірниках; адреса, прізвище, повне ім'я та по-батькові авторів; номери телефонів, E-mail. Необхідно також зазначити автора рукопису, відповідального за спілкування з редакцією журналу.

Матеріали рукопису статті потрібно направляти за адресою: Редакція журналу «Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія «Фізика», Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, фізичний факультет, майдан Свободи, 4, Харків.

INFORMATION FOR THE AUTHORS OF THE ARTICLES
in Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University, Series “Physics”

Journal of V.N.Karazin Kharkiv National University Series Physics publishes articles and concise messages that contain original results of theoretical and experimental studies, as well as analytical reviews of literary sources on various topical issues of physics on the subject of the publication.

The language of the articles is Ukrainian and English.

TOPICS OF THE JOURNAL

1. Theoretical physics.
2. Solid state physics.
3. Physics of low temperatures.
4. Physics of magnetic phenomena.
5. Optics and spectroscopy.
6. General issues of physics and among them: methodology and history of physics, mathematical methods of physical research, methods of teaching physics in high school, technique and methods of physical experiment, etc.

REQUIREMENTS FOR ARTICLE MANUSCRIPTS

The total volume of the manuscript should be no more than 15 pages.

The manuscript of the article consists of a title page, which contains title of the article, initials, surnames, ORCID, authors, postal address of the institution where the work was performed, classification indices according to PACS and UDC systems, e-mail address of one of the authors; abstracts with keywords in Ukrainian and English (the abstract in the language of the article is placed on the title page, the abstract together with the title of the article, initials and surnames of the authors, postal address of the institution and keywords in the second language - at the end of the manuscript); the main text of the article, which should be structured; a list of references with links to DOI, if assigned; captions under figures; tables; figures: graphs, photographs.

Conclusions should not repeat the abstract. The abstract should be at least 1800 characters long. It should reflect the problem statement, research methods, main scientific results and conclusions.

In Ukrainian-language articles, captions for figures and tables are duplicated in English. If the text contains Cyrillic or non-English-language citations, a list of references and a REFERENCES section are provided. In their absence – only the REFERENCES section.

When citing Cyrillic or non-English-language references in REFERENCES, the author's (official) English version of the title of the work and the names of the authors should be given. If it is not available, an English translation (commonly used in the literature, if any) is given. At the end of the reference, the language of the original source from which the translation was made should be indicated – for example, (In Ukrainian).

REQUIREMENTS FOR THE ELECTRONIC VERSION OF THE MANUSCRIPT

The text of the manuscript should be typed in MicrosoftWord format, starting from version 2013 in *.docx format.

The sheet size is A4. Margins: left and right – 2 cm, top – 2.5 cm, bottom – 3 cm. Fonts: Times New Roman (Cyr) and Arial, line spacing: 1.1.

The title and subheadings of the article are typed in capital letters, no period at the end of the title.

The title of the article, authors, organization, and abstract are placed in one column. The main text of the article is arranged in two columns, column width – 8.25 cm, distance between columns – 0.5 cm. It is allowed to arrange the text in one column if the article contains large figures, tables and many large formulas.

Figures and photographs should be scanned with a sufficiently high resolution (300 DPI – 600 DPI) and inserted into the text of the article. Numbers and labels in figures and photographs should be indicated in the language of the main text of the article and should be readable. All physical quantities are given in SI units and in the language of the main text of the article. Letter designations of physical quantities are given in italics.

To write formulas and equations, use the built-in equation editor.

The material of the article is arranged in the following order:

The number of the conditional decimal classification (UDC) and (PACS): font size 10 pt, normal font, no indentation, left margin.

Title of the article: Arial font, size 14 pt, bold, no indentation, centered.

Authors (initials, surnames): Arial font, size 13 pt, normal font, no indents, centered.

Names of organizations (full name of the organization, city, country, e-mail address Times New Roman (Cyr) font, size 9 pt, italicized, no indents, centered.

Abstract (in the language of the main text of the article): Times New Roman (Cyr) font, size 9 pt, normal font, indentation of the first line of the paragraph 0.75 cm, centered.

Keywords: Times New Roman (Cyr) font, size 9 pt, italicized typeface, paragraph line indentation 0.75 cm, width arrangement.

Text of the article: Times New Roman (Cyr) font, size 10 pt, normal font, first line indentation 0.75 cm, width. Words should be separated by only one space. A space after a word before punctuation is not allowed. The text is typed using only soft hyphenation (hyphenation combined with the Ctrl key). A hard space (Ctrl+Shift+space) is placed between the value of a quantity and its unit of measurement.

Subheading names: Times New Roman (Cyr) font, size 10 pt, bold, no indentation, centered.

Caption under the figure: Times New Roman (Cyr) font, size 10 pt, normal italics, indentation of the first and subsequent lines of the paragraph 0.75 cm, centered.

Formulas: Times New Roman (Cyr) font, size 10 pt, normal font, width-wise. Numbering of formulas in parentheses on the right edge of the line.

References: Times New Roman (Cyr) font, size 9 pt, normal font, no indents, width. References to unpublished materials are not allowed. References are given in the original language.

EXAMPLE OF THE REFERENCES

1. I.P. Pinkevich, V.Y. Sugakov. Theory of solids, PPC "Kiev University", K. (2006), 333 p. (In Ukrainian).
2. M.V. Gnatenko. Ukr. J. Phys., 60, 5, 390 (2015). (In Ukrainian). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
3. K. Janakiraman, S. Swamiappan. Materials Letters, 357, 135731 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
4. A.D. Ashby. Phys.Rev., A19, 213 (1985). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>
5. D.V. Vert. In Progress in Metals, ed. by R. Speer, USA, New York (1976), v.4, p.17. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2023.135731>

MATERIALS PROVIDED TO THE EDITOR

1. Two printed copies of the manuscript signed by authors.
2. Electronic version of the manuscript and contact information for communication with authors sent to physics.journal@karazin.ua.
3. A referral from the institution where the work was performed and expert acts in two copies; the name, full name and patronymic of the author; telephone numbers, E-mail, with indication of the author of the manuscript responsible for communicating with the journal.

The materials of the manuscript should be sent to the following address: Editorial of Journal of V. N. Karazin Kharkiv National University, Series "Physics", V. N. Karazin Kharkiv National University, Faculty of Physics, 4 Svobody Square, Kharkiv.

Наукове видання

Вісник Харківського національного університету
імені В. Н. Каразіна

Серія “Фізика”

випуск 40'2024

Збірник наукових праць

Українською та англійською мовами

Комп'ютерне верстання Р. В. Шурінов

Підписано до друку 27.05.2024. Формат 60х84 1/8.

Папір офсетний. Друк цифровий.

Ум. друк. арк. 5,98. Обл.-вид. арк 7,47.

Наклад 100 пр. Зам. № 37/24

Надруковано: ХНУ імені В. Н. Каразіна
61022, Харків, майдан Свободи, 4.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09