01;05

Дислокационная структура и транспортные свойства малоугловых границ наклона в высокотемпературных сверхпроводниках

© С.В. Бобылев, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения РАН,
199178 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступило в Редакцию 27 ноября 2002 г.)

Предложена теоретическая модель, описывающая расщепленные зернограничные дислокации в малоугловых межзеренных границах наклона в высокотемпературных сверхпроводниках. Показано, что расщепление дислокаций в малоугловых границах наклона обычно сопровождается уменьшением их упругой энергии и обусловливает увеличение величины плотности критического тока через такие границы в высокотемпературных сверхпроводниках.

Введение

Уменьшение плотности критического тока J_c в высокотемпературных поликристаллических сверхпроводниках, обусловленное присутствием в них границ зерен, является предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований [1–18]. Влияние границ зерен на J_c связывают с различными факторами: полями напряжений зернограничных дислокаций [6–8], нарушением кристаллографического порядка [6–8], изменениями химического состава [9–11] и неоднородностью распределения электрического заряда [5,12–15] близи границ зерен, а также симметрией параметра порядка и фасетированной структурой границ зерен [16]. При теоретическом описании транспортных свойств границ зерен модели [5–15] используют представления о малоугловых границах зерен как периодических стенках совершенных решеточных дислокаций. Однако такие границы в высокотемпературных сверхпроводниках нередко претерпевают структурные трансформации, которые существенно влияют на их транспортные свойства (см., например, экспериментальные данные [19–22] и теоретические модели [23–27]). В частности, модель [26] дает теоретическое описание экспериментально наблюдаемых [19] малоугловых границ наклона типа [100], в которых каждая из дислокаций расщеплена на три частичных дислокации. Недавно методами электронной микроскопии высокого разрешения в YBaCuO наблюдались малоугловые границы наклона типа [001], в которых каждая из исходно полных дислокаций расщеплена на две частичные дислокации. Такое расщепление не может не влиять на сверхпроводящие транспортные свойства границ зерен. В настоящей работе предложено теоретическое описание процесса расщепления исходно полных зернограничных дислокаций в малоугловых границах наклона типа [001] на частичные дислокации (экспериментально наблюдавшиеся в [21]) и дана оценка влияния такого расщепления на плотность критического тока через малоугловые границы зерен в высокотемпературных сверхпроводниках.

Энергетические характеристики расщепления дислокаций в малоугловых границах наклона

Рассмотрим процесс расщепления полных решеточных дислокаций — элементов структуры малоугловой границы наклона типа [001] с плоскостью (110) в сверхпроводнике $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Для оценки энергетической выгодности расщепления исходно полных краевых дислокаций используем следующую модель. Рассмотрим периодическую стенку полных краевых дислокаций, моделирующую малоугловую границу наклона, и теперь трансформацию такой дислокационной стенки (рис. 1, a) в новую дислокационную структуру (рис. 1, b), в которой одна из полных дислокаций расщепилась на две частичные дислокации с образованием дефекта упаковки между ними. Новая дислокационная структура представляет собой обычную дислокационную стенку с одним элементом структуры экспериментально наблюдаемой [21] малоугловой границы наклона (стенки), состоящей из расщепленных дислокационных конфигураций (рис. 1, c). Для удобства последующих расчетов представим эту расщепленную дислокационную конфигурацию как полную дислокацию и два диполя частичных дислокаций (рис. 2). В таком представлении нижняя дислокация верхнего диполя и верхняя дислокация нижнего диполя расположены в той же точке, что и исходная полная дислокация. Как следствие, суперпозиция этих трех дислокаций (одной полной и двух частичных) эквивалентна отсутствию дислокации в центре расщепленной конфигурации.

Найдем разность полных энергий (на единицу длины дислокаций) новой дислокационной структуры (рис. 1, b) и обычной дислокационной стенки (рис. 1, a). Для краткости будем называть обычную дислокационную стенку (рис. 1, a) „структурой 1“, а новую дислокационную структуру (рис. 1, b) — „структурой 2“. Энергия структуры 1 имеет два составляющие:

$$W_1 = RW_1^{el} + \frac{R}{h_1} W_1^c, \tag{1}$$

где R — длина границы наклона, W_1^{el} — плотность упругой энергии структуры 1 на единицу ее длины, W_1^c — энергия ядра полной (нерасщепленной) дислокации.

Энергия структуры 2 (рис. 1, b) представима в следующем виде:

$$W_2 = RW_1^{el} + \left(\frac{R}{h_1} - 1\right) W_1^c + 2W_{\text{dip}}^{el} + 2W_2^c + W_{\text{int}}^{\text{dip}} + 2W_{\text{int}}^{\text{dip}-b1} + 2(p - r_{0_2})\gamma. \tag{2}$$

Здесь W_{dip}^{el} — собственная упругая энергия диполя частичных дислокаций, W_2^c — энергия ядра частичной дислокации, $W_{\text{int}}^{\text{dip}}$ — энергия взаимодействия между диполями, $W_{\text{int}}^{\text{dip}-b1}$ — энергия упругого взаимодействия диполя и структуры 1, r_{0_2} — радиус ядра частичной дислокации, γ — энергия дефекта упаковки между частичными дислокациями в расщепленной конфигурации (рис. 2). Используя выражения (1) и (2), находим изменение полной энергии системы, сопровождающее трансформацию структуры 1 в структуру 2,

$$\Delta W_{1-2} = W_2 - W_1 = -W_1^c + 2W_{\text{dip}}^{el} + 2W_2^c + W_{\text{int}}^{\text{dip}} + 2W_{\text{int}}^{\text{dip}-b1} + 2(p - r_{0_2})\gamma. \tag{3}$$

Из уравнения $\Delta W_{1-2} = 0$ определяются критические условия, при которых возможна такая трансформация.

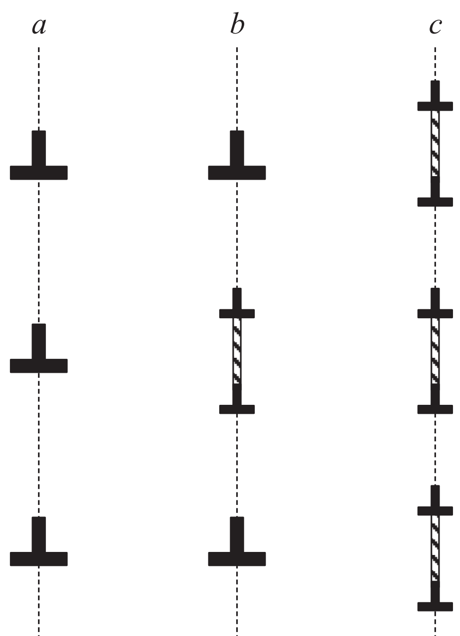

Рис. 1. Дислокационные структуры. Малоугловая граница наклона: a — обычная, b — с одной расщепленной дислокацией, c — все дислокации расщеплены.

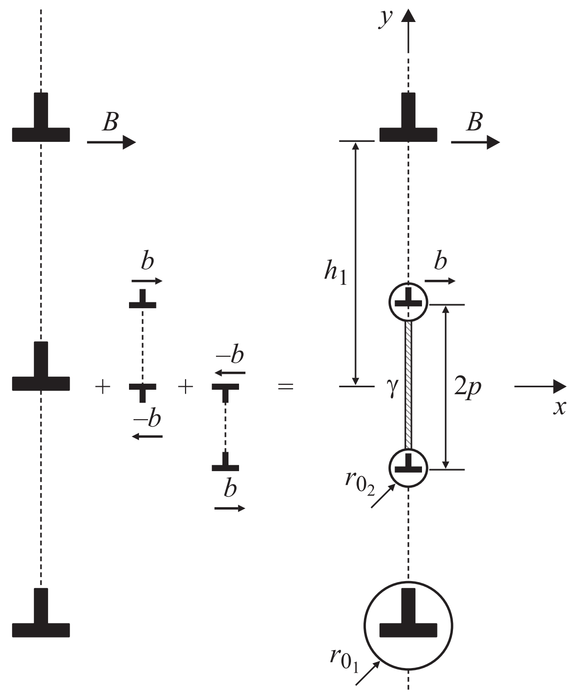

Рис. 2. Представление расщепленной дислокационной конфигурации в виде полной дислокации и двух диполей частичных дислокаций.

Используя формулы работы [26] и их модификации для слагаемых, фигурирующих в правой части (3), получим следующее выражение для изменения полной энергии:

$$\Delta W_{1-2} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}\left(2Z_2 - \frac{B^2}{b^2} Z_1 + 2\ln\frac{2(p - r_{0_2})^2}{r_{0_2}(p + r_{0_2})} - 2\frac{B}{b}\ln\frac{1-\cos\tilde{p}}{1-\cos\tilde{r}_{0_1}}\right) + 2(p - r_{0_2})\gamma. \tag{4}$$

Здесь Z_1 и Z_2 — безразмерные константы порядка единицы, $\tilde{p} = 2\pi p/h_1$, $\tilde{r}_{0_1} = 2\pi r_{0_1}/h_1$, r_{0_1} — радиус ядра нерасщепленной дислокации, h_1 — период дислокационной стенки. В последнее слагаемое выражения (4) входит один из основных параметров задачи — энергия дефекта упаковки γ. В работе [26] для нее использовалась оценка $\gamma = 7GB/[324\pi(1-\nu)]$. Используя ту же оценку, по формуле (4) мы численно исследовали зависимость ΔW_{1-2} от угла разориентировки границы Θ (который связан с параметрами дислокационных структур соотношением Франка $B = 2h_1 \sin(\Theta/2)$) для характерных значений параметров: $B = 2b$, $Z_1 \approx Z_2$, $r_{0_1} \approx B$ и $r_{0_2} \approx b$. Расчеты показывают, что расщепление оказывается энергетически выгодным (т.е. изменение энергии ΔW_{1-2} отрицательно) в достаточно широком интервале разориентировок $0 \le \Theta \le 12°$. Из расчетов также видно, что равновесное расстояние расщепления между соседними частичными дислокациями (т.е. такое

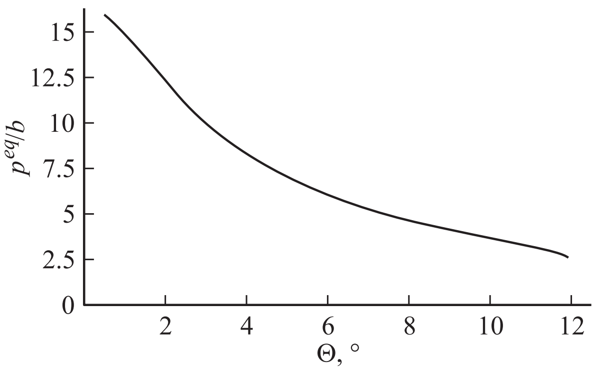

Рис. 3. Зависимость равновесного расстояния расщепления p (в единицах b) между соседними частичными дислокациями от угла разориентировки границы наклона Θ.

расстояние, которое соответствует наибольшему выигрышу $|\Delta W_{1-2}|$ в энергии при переходе от структуры 1 к 2) уменьшается с ростом разориентировки границы Θ (рис. 3).

Транспортные характеристики малоугловых границ наклона с расщепленными дислокационными конфигурациями

Используя результаты предыдущего раздела, проведем оценку изменения плотности критического сверхпроводящего тока через границу наклона, происходящее при расщеплении всех дислокаций. Следуя подходу [5,15], мы полагаем, что вблизи дислокаций образуются „неидеальные" с точки зрения сверхпроводящих свойств области, характеризующиеся нарушениями стехиометрического состава и распределения электрического заряда. В рамках такого подхода плотность критического тока J_c через границу наклона с разориентировкой Θ в первом приближении задается следующим выражением [15]:

$$J_c(\Theta)/J_c(0^\circ) \approx \frac{1}{S}\int\limits_S \exp\{-d(y,z)/\xi\}dy\,dz. \qquad (5)$$

Здесь d — толщина „неидеальной" области, ξ — характеристическая длина затухания, S — площадь границы. Обозначая критические токи через границы наклона, образованные нерасщепленными и расщепленными дислокациями (рис. 1, a, c), как $J_c^{(1)}$ и $J_c^{(2)}$ соответственно и учитывая, что для рассматриваемых дислокационных структур зависимость их характеристик от координаты z отсутствует, запишем их отношение в виде

$$J_c^{(2)}/J_c^{(1)} = \frac{\int\limits_S \exp\{-d^{(2)}(y)/\xi\}dy}{\int\limits_S \exp\{-d^{(1)}(y)/\xi\}dy}, \qquad (6)$$

где $d^{(1)}$ и $d^{(2)}$ — толщины „плохих" областей в границах наклона, где все дислокации расщеплены и нерасщеплены, соответственно.

Очевидно, что в силу периодичности дислокационной стенки, интегрирование в формуле (6) достаточно выполнить в пределах одного периода.

Для границы с нерасщепленными дислокациями (рис. 1, a) зависимость $d^{(1)}$ (в пределах периода стенки) от y задается следующими выражениями (при условии, что система координат выбрана, как на рис. 2) в зависимости от того, происходит ли перекрытие „плохих" областей или нет:

$$d^{(1)} = \begin{cases} \begin{cases} 2\sqrt{R^{(1)^2} - y^2}, & \text{при } -R^{(1)} \le y \le R^{(1)}, \\ 0, & \text{при } -R^{(1)} \le y \le h_1 - R^{(1)}, \end{cases} \\ \text{если } R^{(1)} \le h_1/2 \ \text{(нет перекрытия)} \\ \\ 2\sqrt{R^{(1)^2} - y^2}, \quad \text{при } -h_1/2 \le y \le h_1/2, \\ \text{если } R^{(1)} > h_1/2 \ \text{(перекрытие)}. \end{cases} \qquad (7)$$

Здесь $R^{(1)}$ — радиус „плохой" области нерасщепленной дислокации.

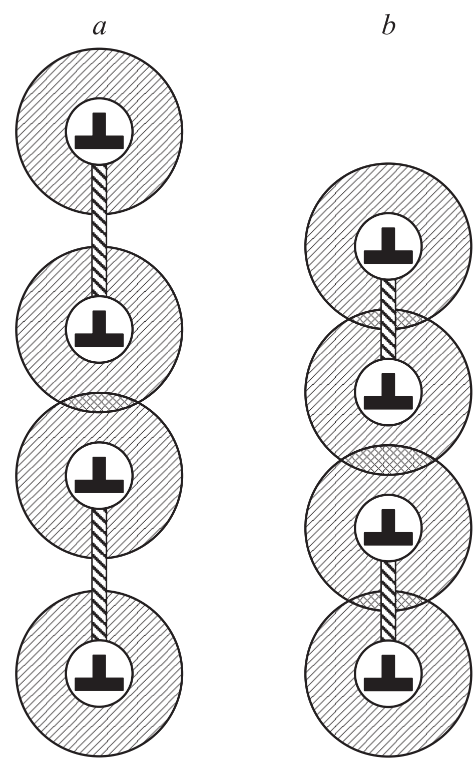

Рис. 4. Перекрытие областей с неидеальной стехиометрией и распределением электрического заряда в расщепленной конфигурации: a — при меньших углах разориентировки имеет место перекрытие „плохих" областей, принадлежащих частичным дислокациям, образующихся при расщеплении соседних полных дислокаций; b — при больших углах происходит перекрытие „плохих" зон частичных дислокаций, образующихся при расщеплении одной полной дислокации.

В случае границы с расщепленными дислокациями (рис. 1, c) ситуация несколько усложняется, так как, возможно, перекрытие „плохих“ областей двух типов: областей, принадлежащих частичным дислокациям, образовавшимся из разных полных дислокаций, и областей вблизи ядер частичных дислокаций одной и той же полной дислокации. Расчеты показывают, что с ростом угла разориентировки Θ сначала происходит перекрытие первого типа (рис. 4, a) и лишь при больших углах происходит второе перекрытие (рис. 4, b). Таким образом, величину $d^{(2)}$ можно записать в следующем виде:

$$d^{(2)} = \begin{cases} \begin{cases} 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - y^2}, \\ \text{при} \;\; -R^{(2)} \le y \le R^{(2)}, \\ 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - (y-2p)^2}, \\ \text{при} \;\; -R^{(2)} + 2p \le y \le R^{(2)} + 2p, \\ 0, \;\; \text{при} \;\; R^{(2)} \le y \le -R^{(2)} + 2p \\ \quad\;\; \text{или} \;\; R^{(2)} + 2p \le y \le h_1 - R^{(2)}, \end{cases} \\ \text{если} \;\; R^{(2)} < p \;\; \text{и} \;\; R^{(2)} < h_1/2 - p, \\ \begin{cases} 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - y^2}, \\ \text{при} \;\; -h_1/2 + p \le y \le R^{(2)}, \\ 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - (y-2p)^2}, \\ \text{при} \;\; -R^{(2)} + 2p \le y \le h_1/2 + 2p, \\ 0, \;\; \text{при} \;\; R^{(2)} \le y \le -R^{(2)} + 2p, \end{cases} \\ \text{если} \;\; R^{(2)} < p \;\; \text{и} \;\; R^{(2)} > h_1/2 - p, \\ \begin{cases} 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - y^2}, \\ \text{при} \;\; -R^{(2)} \le y \le p, \\ 2\sqrt{{R^{(2)}}^2 - (y-2p)^2}, \\ \text{при} \;\; p \le y \le h_1/2 + p, \end{cases} \\ \text{если} \;\; R^{(2)} > p \;\; \text{и} \;\; R^{(2)} > h_1/2 - p. \end{cases} \qquad (8)$$

Используя выражения (7) и (8), а также оценки $R^{(i)} = \lambda r_{0_i}$, где $\lambda \approx 3$, и $\xi \approx 1.5\,\text{nm}$ [15], по формуле (6) можно получить отношение критических сверхпроводящих токов через границы, состоящие из расщепленных и нерасщепленных дислокаций. Результаты расчетов представлены в виде кривой на рис. 5.

Согласно этой кривой, критический ток в расщепленной конфигурации всегда оказывается больше, чем в нерасщепленной, что легко объясняется с геометрической точки зрения меньшей площадью „плохих“ областей в случае расщепленной конфигурации (площадь двух кругов меньше площади одного вдвое большего радиуса). Медленный рост отношения $J_c^{(2)}/J_c^{(1)}$ в области малых разориентировок объясняется увеличением доли „плохих“ областей и отмеченным выше преимуществом расщепленной конфигурации над нерасщепленной, которое становится все значительнее с уменьшением „хороших“ зон. Резкий рост отношения $J_c^{(2)}/J_c^{(1)}$ вблизи $\Theta = 7°$ происходит, когда начинается перекрытие в расщепленной конфигурации (рис. 4, a). В этом случае снижается скорость падения критического тока, контролируемого „плохими“ областями, с ростом угла разориентировки в расщепленной конфигурации. Замедление же роста отношения токов, начинающееся при $\Theta = 9.5°$, объясняется началом перекрытия „плохих“ зон в нерасщепленной конфигурации.

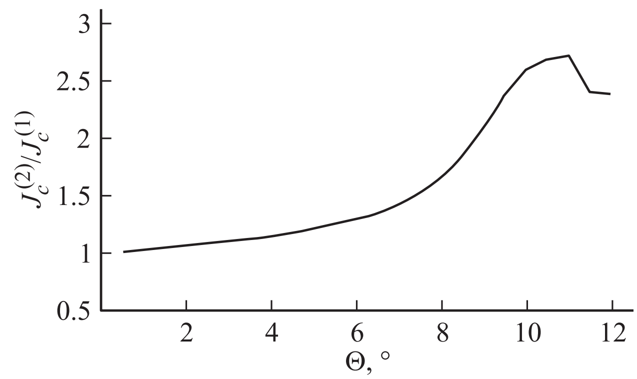

Рис. 5. Зависимость отношения критических токов через границы наклона, состоящие из расщепленных дислокационных конфигураций ($J_c^{(2)}$) и нерасщепленных дислокаций ($J_c^{(1)}$) от угла разориентировки Θ границы наклона.

Заключение

Таким образом, в широком диапазоне разориентировок малоугловых границ наклона ($0 \le \Theta \le 12°$) расщепление исходно полных дислокаций на частичные является энергетически выгодным. Это согласуется с экспериментальными данными [19–23]. Расщепление дислокаций в общем случае приводит к увеличению плотности критического тока через межзеренную границу. Данное положение, следующее из нашего теоретического анализа, следует учитывать, в частности, при расчете величины критического тока в поликристаллических сверхпроводниках с помощью методов теории протекания [17].

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 01-02-16853) и Офиса морских исследований США (the Office of US Naval Research; грант N00014-99-1-0896).

Список литературы

[1] *Dimos D., Chaudhari P., Mannhart J.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 219.
[2] *Dimos D., Chaudhari P., Mannhart J.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. P. 4038.
[3] *Ivanov Z.G., Nilsson P.-A., Winkler D.* et al. // Appl. Phys. Lett. 1991. Vol. 59. P. 3030.
[4] *Prester M.* // Supercond. Sci. Technol. 1998. Vol. 11. P. 333.
[5] *Browning N.D., James E.M., Kyosuke K.* et al. // Rev. Adv. Mater. Sci. 2000. Vol. 1. P. 1.
[6] *Chisholm M.F., Pennycook S.J.* // Nature. 1991. Vol. 351. P. 47.
[7] *Agassi D., Pande C.S., Masumura R.A.* // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. P. 16 237.
[8] *Gurevich A., Pashitskii E.A.* // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. 13 878.
[9] *Kroeger D.M., Choudhury A., Brynestad J.* et al. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 64. P. 331.
[10] *Campbell A.M.* // Supercond. Sci. Technol. 1989. Vol. 2. P. 287.
[11] *Betouras H., Joynt R.* // Physica C. 1995. Vol. 250. P. 256.
[12] *Schmehl A., Goetz B., Schulz R.R.* et al. // Europhys. Lett. 1999. Vol. 47. P. 110.
[13] *Hilgenkamp H., Mannhart J.* // Appl. Phys. Lett. 1998. Vol. 73. P. 265.
[14] *Mannhart J., Hilgenkamp H.* // Supercond. Sci. Technol. 1997. Vol. 10. P. 880.
[15] *Ovid'ko I.A.* // Mater. Sci. Eng. A. 2001. Vol. 313. P. 207.
[16] *Hilgenkamp H., Mannhart J., Mayer B.* // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. P. 14 586.
[17] *Haslinger R., Joynt R.* // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 61. P. 4206.
[18] *Amer M., Maguire J., Cai L.* et al. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. P. 8030.
[19] *Chisholm M.F., Smith D.A.* // Philos. Mag. A. 1989. Vol. 59. P. 181.
[20] *Tsu I.-F., Wang J.-L., Kaiser D.L.* et al. // Physica C. 1998. Vol. 306. P. 163.
[21] *Kung H., Hirth J.P., Foltyn S.R.* et al. // Phyl. Mag. Lett. 2001. Vol. 81. P. 85.
[22] *Tsu I.-F., Babcock S.E., Kaiser D.L.* // J. Mater. Res. 1996. Vol. 11. P. 1383.
[23] *Meilikhov E.Z.* // Physica C. 1996. Vol. 271. P. 277.
[24] *Кукушкин С.А., Овидько И.А., Осипов А.В.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. С. 36.
[25] *Ovid'ko I.A.* // J. Phys. 2001. Vol. 13. P. L97.
[26] *Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A.* // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63. P. 064515.
[27] *Bobylev S.V., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. P. 224 507.