

Расщепление дислокаций в малоугловых границах зерен в оксидных сверхпроводниках

© М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 28 марта 2000 г.)

Предложена теоретическая модель для описания экспериментально наблюдаемого [1] образования расщепленных дислокаций в малоугловых границах наклона в оксидных сверхпроводниках. Теоретически определены условия, при которых расщепление дислокаций в малоугловых границах наклона типа [100] является энергетически выгодным.

Настоящая работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16075) и Офиса Морских Исследований США (the Office of US Naval Research) (грант N00014-99-1-0896).

Границы зерен в оксидных сверхпроводниках с высокой температурой сверхпроводящего перехода (T_c) обуславливают драматическое снижение величины критического тока в поликристаллических образцах по сравнению с монокристаллами (например, [2–7]). Для объяснения данного эффекта было предложено несколько моделей [8–16], однако физический механизм влияния границ зерен на высокотемпературную сверхпроводимость в настоящее время однозначно не определен (см. дискуссию в обзорах [6,7,17]). Наиболее замечательным фактом, установленным экспериментально в рассматриваемой области, является существенное различие между характером влияния малоугловых и высокоугловых границ зерен на высокотемпературную сверхпроводимость [2–7]. Так, плотность критического тока J_c через малоугловые границы резко уменьшается с увеличением угла разориентировки θ границы примерно по следующему экспоненциальному закону: $J_c(\theta) = J_0(0) \exp(-\theta/8^\circ)$, где θ меняется от 0 до ориентировочно 15° . Высокоугловые границы зерен характеризуются чрезвычайно малыми значениями плотности критического тока $J_c \approx (10^{-3} - 10^{-2})J_c(0)$, которые слабо зависят от угла разориентировки $\theta (> 15^\circ)$. Для объяснения различия между сверхпроводящими свойствами малоугловых и высокоугловых границ зерен модели [8–11,16] эти свойства связывают с влиянием структуры ко́ров и полей механических напряжений границ зерен на высокотемпературную сверхпроводимость. В контексте обсуждаемых моделей особый интерес представляет анализ трансформаций границ зерен, при которых структура ко́ров и поля напряжений границ зерен претерпевают существенные изменения. Основная цель настоящей работы — построение теоретической модели, описывающей экспериментально наблюдаемое [1] расщепление дислокаций, составляющих малоугловые границы наклона в оксидных сверхпроводниках.

1. Модель малоугловой границы наклона с расщепленными дислокациями

Малоугловые границы зерен, характеризующиеся углами разориентировки $\theta \leq 15^\circ$, обычно представляют собой стенки решетчатых дислокаций (с векторами Бюргерса, являющимися полными векторами кристаллической решетки) [18] (рис. 1, *a*). В то же время экспериментально установлено [1], что структура малоугловых границ наклона [100] в сверхпроводящей керамике $YBa_2Cu_3O_7$ отлична от "обычной" структуры (рис. 1, *a*). При $\theta = 5^\circ$ граница представляет собой стенку частичных краевых дислокаций, объединенных в тройки с суммарным вектором Бюргерса $B \approx 1.17 \text{ nm}$ [1] (рис. 1, *b*). В пределах каждой такой тройки одинаковые дислокации с вектором Бюргерса $b = B/3$ стоят друг над другом, и расстояние между ними p равно примерно $12b$ при $\theta = 5^\circ$. В области углов $\theta \leq 5^\circ$ структура границы осталась пока неизученной, и можно предположить, что либо она также состоит из аналогичных троек частичных дислокаций, либо из полных нерасщепленных краевых дислокаций с вектором Бюргерса $B \approx 1.17 \text{ nm}$.

Рассмотрим, при каких условиях возможно образование расщепленных дислокаций в малоугловых границах наклона. Будем различать два основных состояния структуры границы: первое — стенка нерасщепленных краевых дислокаций с векторами Бюргерса B и периодом h_1 (рис. 1, *a*); второе — стенка расщепленных краевых дислокаций с теми же суммарными векторами Бюргерса B , с векторами Бюргерса частичных краевых дислокаций $b = B/3$, расстояниями между ними p и периодом такой структуры h_2 (рис. 1, *b*). Поскольку нас интересуют именно области перехода между выделенными состояниями, будем предполагать, что новое состояние (рис. 1, *b*) зарождается внутри предыдущего (рис. 1, *a*). Тогда задача сводится к отысканию условий, при которых становится энергетически выгодным образование одного

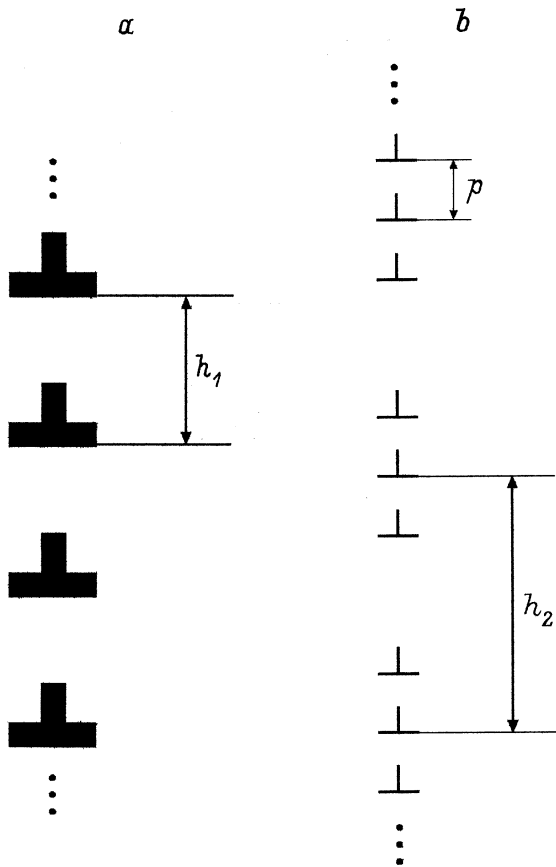


Рис. 1. Структуры малоугловых границ наклона. *a* — стенка полных решеточных дислокаций (структура 1), *b* — стенка расщепленных дислокаций (структура 2).

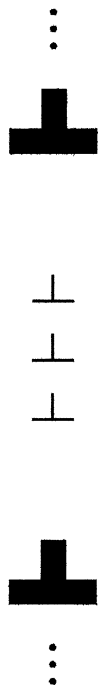


Рис. 2. Расщепленная дислокация в малоугловой границе, состоящей из полных решеточных дислокаций.

нового структурного элемента на месте одного старого, тогда как все остальные структурные элементы границы остаются старыми (рис. 2).

Геометрически, чтобы образовать на месте старого элемента структуры 1 новый элемент структуры 2 (рис. 2), достаточно добавить к нерасщепленной дислокации с вектором Бюргерса *B* два диполя частичных краевых дислокаций: один (“верхний”) типа вычитания, а второй (“нижний”) типа внедрения. Тогда нижняя дислокация верхнего диполя и верхняя дислокация нижнего диполя, вступая в реакцию с исходной дислокацией, превращают ее в частичную, такую же как и две оставшиеся (верхняя дислокация верхнего диполя и нижняя дислокация нижнего диполя).

2. Энергетические условия образования расщепленных дислокаций в малоугловых границах наклона

Рассмотрим, как при замене старого структурного элемента новым (рис. 2) изменится полная энергия границы. Энергия границы в первом состоянии может быть представлена суммой

$$W_I = RW_I^{el} + \frac{R}{h_1} W_I^c, \quad (1)$$

где *R* — характерная длина границы, W_I^{el} — плотность упругой энергии границы на единицу ее длины и W_I^c — энергия ядра нерасщепленной зернограницной дислокации.

Энергия границы в переходном состоянии (рис. 2) имеет вид

$$W_{I-2} = RW_I^{el} + \left(\frac{R}{h_1} - 1\right) W_I^c + 2W_{dip}^{el} + 3W_2^c + W_{int}^{dip} + 2W_{int}^{dip-bl} + 2(p - 2r_{0_2})\gamma, \quad (2)$$

где W_{dip}^{el} — собственная упругая энергия диполя частичных дислокаций, W_2^c — энергия ядра частичной дислокации, W_{int}^{dip} — энергия взаимодействия диполей между собой, W_{int}^{dip-bl} — энергия взаимодействия диполя с исходной границей в состоянии 1, r_{0_2} — радиус ядра частичной дислокации, и γ — энергия дефекта упаковки между частичными дислокациями.

Таким образом, при переходе структуры границы из состояния 1 в указанное промежуточное исходная энергия изменяется на величину

$$\Delta W_{I-2} = W_{I-2} - W_I = -W_I^c + 2W_{dip}^{el} + 3W_2^c + W_{int}^{dip} + 2W_{int}^{dip-bl} + 2(p - 2r_{0_2})\gamma, \quad (3)$$

равенство которой нулю определяет критические условия перехода. Энергии ядер исходной нерасщепленной

дислокации W_1^c и частичных дислокаций W_2^c даются известным выражением [18]

$$W_i^c = \frac{Gb_i^2 Z_i}{4\pi(1-\nu)}, \quad (4)$$

где G — модуль сдвига, ν — постоянная Пуассона, Z_i — безразмерные константы порядка единицы, $i = 1, 2$, $b_1 = B$, $b_2 = b$. Собственную упругую энергию диполя частичных дислокаций легко рассчитать как работу по зарождению диполя в его собственном поле упругих напряжений σ_{xx}^{dip} ($x = 0, y$) [18]

$$W_{\text{dip}}^{\text{el}} = \frac{b}{2} \int_{r_{0_2}}^{p-r_{0_2}} \sigma_{xx}^{\text{dip}}(x=0, y) dy = -\frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \times \int_{r_{0_2}}^{p-r_{0_2}} \left(\frac{1}{y-p} - \frac{1}{y} \right) dy = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{p-r_{0_2}}{r_{0_2}}. \quad (5)$$

Аналогично рассчитываются и энергии взаимодействия диполей между собой $W_{\text{int}}^{\text{dip}}$ и с исходной границей $W_{\text{int}}^{\text{dip}-bI}$. Первая определяется как работа по зарождению одного диполя в упругом поле другого

$$W_{\text{int}}^{\text{dip}} = b \int_{r_{0_2}}^p \sigma_{xx}^{\text{dip}}(x=0, y) dy = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \times \int_{r_{0_2}}^p \left(\frac{1}{y+p} - \frac{1}{y} \right) dy = -\frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{p+r_{0_2}}{2r_{0_2}}. \quad (6)$$

Вторая — как работа по зарождению диполя в упругом поле исходной границы $\sigma_{xx}^{bI}(x, y)$, выражение для которого имеет вид [18]

$$\sigma_{xx}^{bI}(x, y) = -\frac{GB \sin \tilde{y} (\text{ch} \tilde{x} - \cos \tilde{y} + \tilde{x} \text{sh} \tilde{x})}{2(1-\nu)h_1 (\text{ch} \tilde{x} - \cos \tilde{y})^2}, \quad (7)$$

где введено обозначение $\tilde{t} = 2\pi t/h_1$. Тогда энергия $W_{\text{int}}^{\text{dip}-bI}$ определяется выражением

$$W_{\text{int}}^{\text{dip}-bI} = b \int_{r_{0_1}}^p \sigma_{xx}^{bI}(x=0, y) dy = -\frac{GBb}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{1 - \cos \tilde{p}}{1 - \cos \tilde{r}_{0_1}}, \quad (8)$$

где r_{0_1} — параметр обрезания упругого поля исходной дислокации на ее ядре.

Подставляя (4)–(6) и (8) в (3), получаем

$$\Delta W_{1-2} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \left(3Z_2 + \frac{B^2}{b^2} Z_1 + 2 \ln \frac{2(p-r_{0_2})^2}{r_{0_2}(p+r_{0_2})} - 2 \frac{B}{b} \ln \frac{1 - \cos \tilde{p}}{1 - \cos \tilde{r}_{0_1}} \right) + 2(p-2r_{0_2})\gamma. \quad (9)$$

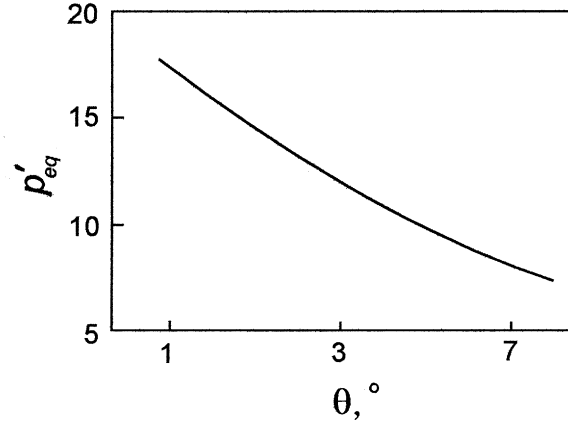


Рис. 3. Зависимость p'_{eq} ($= p_{\text{eq}}/b$) от угла разориентировки границы θ .

Величину энергии дефекта упаковки возьмем из работы [1], авторы которой получили оценку $\gamma \approx 7GB/[324\pi \times (1-\nu)]$.

Численный анализ выражения (9) проводился для значений параметров $B = 3b$, $Z_1 \approx Z_2 \approx 1$, $r_{0_1} \approx B$ и $r_{0_2} \approx b$. Оказалось, что в интервале малых углов $\theta \approx B/h_1$ от 0 до 7° при $2b \leq p \leq 17b$ изменение полной энергии ΔW_{1-2} отрицательно. Это означает, что при таких величинах угла разориентации всегда энергетически выгоднее иметь тройку частичных зернограницных дислокаций, а не полные зернограницные дислокации. Оказалось также, что с увеличением θ снижается равновесное значение расстояния p_{eq} между частичными дислокациями в тройке (т.е. такое p , при котором выигрыш в энергии ΔW_{1-2} становится наибольшим по абсолютной величине) (рис. 3). Отметим, что для $\theta = 5^\circ$ наши расчеты дают $p_{\text{eq}} \approx 11b$, что хорошо согласуется с наблюдавшейся в [1] величиной порядка $12b$.

Таким образом, разработанная в настоящей работе теоретическая модель эффективно описывает условия образования расщепленных дислокаций в малоугловых границах наклона в оксидных сверхпроводниках. В рамках модели основная движущая сила для расщепления дислокаций в малоугловых границах связана с уменьшением упругой энергии границы при указанном расщеплении. Показано, что расщепление дислокаций в малоугловых границах наклона [100] энергетически выгодно в сверхпроводниках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ для границ с углами разориентировки $\theta \leq 7^\circ$, что соответствует экспериментальным данным [1].

Плотность критического тока J_c через малоугловые границы наклона в оксидных сверхпроводниках резко падает с увеличением угла разориентировки границы θ от 0 до примерно 15° [2–7]. Модели [8–16] влияния границ зерен на высокотемпературную сверхпроводимость используют представления об ”обычных” малоугловых границах — стенках полных решеточных дислокаций (рис. 1, а). Однако в контексте данных экспериментов [1]

и теоретического анализа настоящей работы результаты моделей [8–16] представляются дискуссионными в общем случае. В частности, возможность расщепления дислокаций в малоугловых границах наклона [100] (рис. 1, *b* и 2) обязательно должна приниматься во внимание в дальнейших работах по теоретическому описанию влияния структуры кривов и полей напряжений границ зерен на высокотемпературную сверхпроводимость.

Список литературы

- [1] M.F. Chisholm, D.A. Smith. *Phil. Mag.* **A59**, 2, 181 (1989).
- [2] D. Dimos, P. Chaudhari, J. Mannhart, F.K. LeGoues. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2, 219 (1988).
- [3] D. Dimos, P. Chaudhari, J. Mannhart. *Phys. Rev.* **B41**, 7, 4038 (1990).
- [4] Z.G. Ivanov, P.-Å. Nilsson, D. Winkler, J.A. Alarco, T. Claeson, E.A. Stepantsov, A.Ya. Tzalenchuk. *Appl. Phys. Lett.* **59**, 24, 3030 (1991).
- [5] S.E. Russek, D.K. Lathrop, B.H. Moeckly, R.A. Buhrmann, D.H. Shin. *Appl. Phys. Lett.* **57**, 11, 1155 (1990).
- [6] S.E. Babcock, J.L. Vargas. *Annu. Rev. Mater. Sci.* **25**, 193 (1995).
- [7] M. Prester. *Supercond. Sci. Technol.* **11**, 3, 333 (1998).
- [8] M.F. Chisholm, S.J. Pennycook. *Nature* **351**, 47 (1991).
- [9] K. Jagannadham, J. Narayan. *Phil. Mag.* **B61**, 2, 129 (1990).
- [10] D. Agassi, C.S. Pande, R.A. Masumura. *Phys. Rev.* **B52**, 22, 16237 (1995).
- [11] D.M. Kroeger, A. Choudhury, J. Brynstad, R.K. Williams, R.A. Padgett, W.A. Coghlan. *J. Appl. Phys.* **64**, 1, 331 (1988).
- [12] H. Hilgenkamp, J. Mannhart, B. Mayer. *Phys. Rev.* **B53**, 21, 14586 (1996).
- [13] H. Hilgenkamp, J. Mannhart. *Appl. Phys.* **A64**, 4, 553 (1997).
- [14] H. Hilgenkamp, J. Mannhart. *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3, 265 (1998).
- [15] J. Mannhart, H. Hilgenkamp. *Supercond. Sci. Technol.* **10**, 6, 880 (1997).
- [16] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, I.A. Ovid'ko. *Mater. Phys. Mech.* **1**, 1, 49 (2000).
- [17] N.D. Browning, E.M. James, K. Kishida, I. Arslan, J.P. Buban, J.A. Zaborac, S.J. Pennycook, Y. Xin, G. Duscher. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **1**, 1, 1 (2000).
- [18] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of Dislocations*. John Wiley, N.Y. (1982).