

- [9] Shiba h a r a K., S a i t o T., N i s h i n o S., M a t s u n a m i H. Jn. E t e n d e d A b s t r a c t s o f t h e 18-t h I n t e r n a t i o n a l c o n f e r e n c e o n S o l i d S t a t e D e v i c e s a n d M a t e r i a l s, T o k y o, 1986, P. 717-718.
- [10] P a l m o u r J.W., K o n g H.C., D a v i s R.F. // J. A p p. P h y s. 1988. V. 64. N 4. P. 2168-2177.
- [11] А н и к и н М.М., Г у с е в а Н.Б., Д м и т р и е в В.А., С ы р к и н А.Л. // Изв. АН СССР. Сер. Неорг. матер. 1984. № 10. С. 1768-1770.
- [12] П о п о в И.В., С ы р к и н А.Л., Ч е л н о к о в В.Е. / П и с ь м а в Ж Т Ф. 1986. Т. 12. В. 4. С. 240-244.

Физико-технический институт  
им. А.Ф. Иоффе АН СССР,  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
4 апреля 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 16 26 августа 1989 г.  
05.4

## АТОМНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ ВАКАНСИЙ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

В.В. К и р с а н о в, Н.Н. М у с и н

Открытые в 1986 году высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) [1] привлекли внимание возможностью широкого применения в энергетике, промышленности, науке.

При этом встает вопрос о радиационной стойкости ВТСП. Как показывают первые эксперименты по облучению ВТСП нейтронами [2] и ионами [3, 4], эти материалы очень чувствительны к радиационным дефектам. Пока неясно, какой тип дефектов является главным в ВТСП. С целью выяснения природы радиационных дефектов планируется провести ряд вычислительных экспериментов по моделированию точечных дефектов в ВТСП. Первые результаты описаны в данном письме. Методом молекулярной динамики была определена атомная конфигурация вакансии меди в  $La_{1.85}Ba_{0.15}CuO_4$ .

Вычислительный эксперимент проводился на модельном кристаллите, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда и содержащем 635 атомов. Для описания взаимодействия между атомами использовался парный потенциал, предложенный в работе [5]. Модельный кристаллит окружался упругим континуумом. Взаимодействие поверхностных атомов с упругим континуумом моделировалось введением постоянных поверхностных и упругих сил. Избыток энергии отводился посредством искусственной диссипации энергии. Для адекватного решения задачи о

Рис. 1. Картина смещений атомов вокруг вакансии меди.

движении атомов временной интервал выбирался в диапазоне  $(2-5) \cdot 10^{-16}$  с, что на порядок меньше типичного шага по времени для подобного класса задач [8].

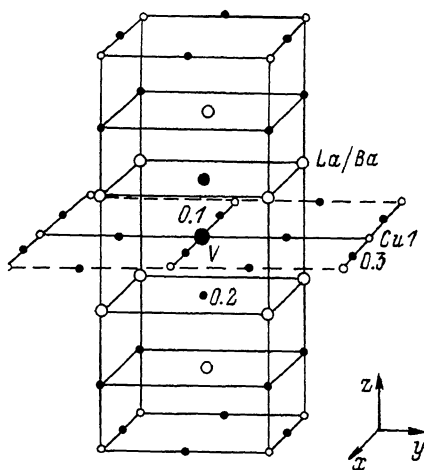
Параметры решетки кристалла  $La_{1,85}Ba_{0,15}CuO_4$  составляли:  $a = 3.7817$  Å,  $c = 13.2487$  Å. Их значения, а также координаты атомов в элементарной ячейке были взяты из работы [6].

Рассчитывалась атомная конфигурация вакансии в узле меди. На рис. 1 показано расположение атомов вокруг вакансии. Стрелками показаны вектора смещений атомов из положений в идеальном кристалле. Обозначения возле узлов определяют сорт атома, занимающего данный узел. Распределение атомов по координационным сферам следующее: 1 координационная сфера - O1, вторая - O2, третья -  $La/Ba$ , четвертая -  $CuI$ , пятая - O3. Величины смещений представлены в таблице. Динамика изменения величины смещений во время эксперимента показана на рис. 2.

Как видно из рис. 1 и таблицы, поведение атомов отличается от их поведения в более простых веществах [7]. Можно выделить два основных отличия.

1. **Направление отклонений атомов.** Атомы первой, второй и пятой координационных сфер смещаются в направлении от вакансии, а атомы третьей и четвертой координационных сфер - к вакансии. При этом необходимо отметить, что первая группа атомов состоит из анионов (ионов кислорода), а вторая - из катионов (ионов  $La/Ba$  и  $Cu$ ). Решетку  $La_{1,85}Ba_{0,15}CuO_4$  можно разделить на две подрешетки: подрешетку анионов и подрешетку катионов. Тогда для подрешетки анионов введение вакансии в узел меди эквивалентно введению межузельного атома, что и вызывает смещение ионов кислорода от вакансии. Для подрешетки катионов введение вакансии приводит к смещению ионов в сторону к вакансии.

2. **Величина отклонений.** Анионы в целом отклоняются сильнее, чем катионы. Это может быть связано с разной массой ионов: ионы кислорода, как более легкие, отклоняются сильнее. Следует указать на неожиданное сильное смещение ионов  $La/Ba$  в отличие от ионов  $Cu$ .



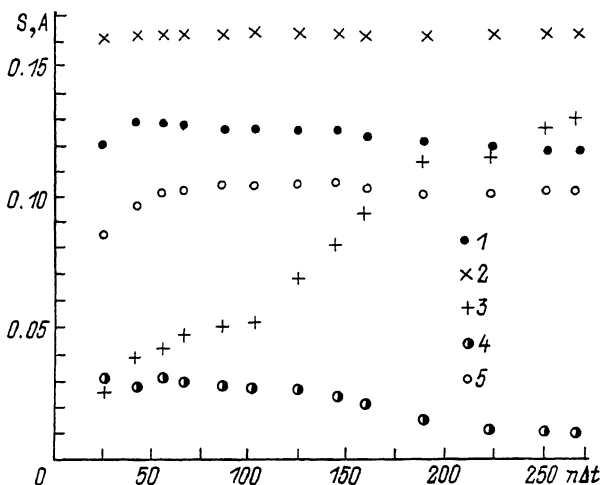


Рис. 2. Изменение величины смещений в процессе вычислительного эксперимента,  $\Delta t = 2.64 \cdot 10^{-15}$  с. Координационные сферы: первая - 1, вторая 2, третья - 3, четвертая - 4, пятая - 5.

Величина отклонений атомов пяти координационных сфер  $La_{1.85}Ba_{0.15}SiO_4$  от положения равновесия

	Номер координационной сферы				
	1	2	3	4	5
Смещение, А	0.12	0.16	0.13	0.01	0.1

Поведение атомов вокруг вакансии имеет немонотонный характер и по величине отклонений, и по направлениям их отклонения. Разработанный метод позволяет рассчитывать атомные конфигурации вакансий и других точечных дефектов для известных в настоящее время ВТСП, что и предполагается сделать в самое ближайшее время.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] V e d n o r z G., M u l l e r K.A. // Z. Phys. 1986. V. B64 P. 189-190.
- [2] Д а в ы д о в С.А., К а р ь к и н А.Б., М и р м е л ь - ш т е й н А.В. и др. // ФММ. 1987. Т. 64. В. 2. С. 399-400.

- [3] Антоненко С.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. В. 9. С. 362-364.
- [4] Антоненко С.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. В. 5. С. 260-263.
- [5] Prade J., Kulkarni A., Wette F. // Solid Commun. 1987. V. 64. N 10. P. 1267-1271.
- [6] Jorgensen J., Schuttler H., Hinks D. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 10. P. 1024-1027.
- [7] Gibson J., Golland A., Milgram M., Vineyard G. // Phys. Rev. 1960. V. 120. P. 1229-1238.
- [8] Жетбаева М.П., Кирсанов В.В. Расчет атомных конфигураций и взаимодействия дефектов разных типов в металлах. ИЯФ АН КазССР, Препринт № 3-81, Алма-Ата, 1981.

Калининский политехнический институт

Поступило в Редакцию  
2 января 1989 г.  
В окончательной редакции  
14 июня 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 16  
04; 05.2

26 августа 1989 г.

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЛНОВОГО ФРОНТА ЭЛЕКТРОТЕПЛОВОГО РАЗОГРЕВА В ДИЭЛЕКТРИКАХ

П.Н. Бондаренко, О.А. Емельянов,  
С.Н. Койков

В сильных электрических полях наблюдается электротепловой разогрев диэлектриков, который может завершиться тепловым пробоем [1]. Классическая теория этого явления была разработана Фоком и предполагала экспоненциальную температурную зависимость удельной мощности тепловыделения  $q_v(T)$ , обусловленную диэлектрическими потерями. В указанном случае диэлектрические потери имеют место вследствие сквозной проводимости  $\gamma = \gamma_0 \exp\left[-\frac{W}{kT}\right] = A \exp[b(T - T_0)]$  (как на постоянном, так и на переменном токе). В действительности температурная зависимость  $q_v(T)$  на переменном токе может иметь максимум, обусловленный релаксационными диэлектрическими потерями. В данной работе показано, что в этом случае могут наблюдаться своеобразные явления - наличие двух устойчивых состояний теплового равновесия и распространение волнового фронта разогрева по диэлектрику.