

Моделирование фазовых переходов в вихревой системе высокотемпературных сверхпроводников методом Монте-Карло (Обзор)

М. Е. Грачева, М. В. Катаргин, В. А. Кашурников, И. А. Руднев

Московский государственный инженерно-физический институт (Технический университет),
Россия, 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31
E-mail: kash@supercon.mephi.ru

Статья поступила в редакцию 25 марта 1997 г., после переработки 23 июня 1997 г.

В обзоре представлены результаты последних публикаций по моделированию методом Монте-Карло вихревых систем в высокотемпературных сверхпроводниках. Приведены зависимости основных характеристик вихревого состояния (энергии, теплоемкости, теплового движения, структурного параметра порядка и др.) от внешних параметров (температуры, магнитного поля). Рассмотрены фаза вихревого стекла, влияние дефектов на фазовые диаграммы, а также основные фазовые переходы в двумерных и трехмерных вихревых структурах – плавление и 2D–3D переход.

В огляді подано результати останніх публікацій з моделюванням методом Монте-Карло вихорових систем у високотемпературних надпровідниках. Наведено залежності основних характеристик вихорового стану (енергії, теплоємності, теплового руху, структурного параметра упорядкування та ін.) від зовнішніх параметрів (температури, магнітного поля). Розглянуто фазу вихорового скла, вплив дефектів на фазові діаграми, а також основні фазові переходи в двовимірних та тривимірних вихорових структурах – плавлення та 2D–3D переході.

PACS: 74.20.-z, 74.55.-w, 74.60.Ec, 74.60.Ge, 74.72.-h

Содержание

Введение	1151
1. Моделирование решетки вихрей	1153
2. Параметры и характеристики решетки вихрей. Эксперимент и моделирование	1154
2.1. Распределение магнитного поля в вихре, структура вихря. Радиус взаимодействия вихрей	1154
2.2. Равновесное состояние решетки вихрей	1154
2.3. Структурный фактор. Параметр порядка	1155
2.4. Теплоемкость решетки вихрей	1155
2.5. Подвижность вихрей	1155
3. Фазовые диаграммы (вихревая решетка, «стекло», вихревая жидкость, потеря когерентности между слоями)	1156
3.1. Плавление вихревой решетки в 2D системе	1156
3.2. Переход плавления, фаза вихревого стекла	1156
3.3. Переход 2D–3D	1158
4. Влияние дефектов на решетку вихрей	1158
Заключение	1159
Список литературы	1160

Введение

Открытие сверхпроводников с высокой температурой сверхпроводящего перехода увеличило ин-

терес к изучению природы смешанного состояния, в котором сверхпроводники сосуществуют с неоднородным магнитным полем внутри материала.

На фазовой H - T -диаграмме в традиционных низкотемпературных сверхпроводниках имеется область смешанного состояния [1], ограниченная зависимостями от температуры верхнего H_{c2} и нижнего H_{c1} критических полей. В высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) комбинация высоких температур, малой длины когерентности и сильной анизотропии свойств усиливает роль тепловых флуктуаций для линий магнитного потока, приводя к заметным изменениям природы и фазовой картины смешанного состояния. Наиболее сильный эффект от термических флуктуаций выражается в возможности плавления вихревой решетки и перехода в вихревую жидкость при температурах гораздо ниже температуры сверхпроводящего перехода [2,3]. На фазовой диаграмме появляется область, занимаемая вихревой жидкостью [4]. Присутствие дефектов в материале приводит к пиннингу вихревых линий, который увеличивает число возможных вихревых состояний. В частности, разупорядочение вихревой решетки приводит к переходу ее в состояние вихревого стекла [5–8]. Следует отметить, что флуктуации в традиционных сверхпроводниках также интенсивно исследуются в рамках различных подходов (см., например, [9,10]), основанных на стандартном рассмотрении функционала Гинзбурга—Ландау, который описывается параметром порядка Ψ . Расчеты флуктуаций $\langle|\Psi|^2\rangle$ при значениях магнитного поля близких к H_{c2} при большом числе Гинзбурга приводят к точкам возрастания $\langle|\Psi|^2\rangle$ при температурах $T < T_c$, что можно связать с плавлением абрикосовской решетки [9,10]. С нашей точки зрения, рассмотрение тепловых флуктуаций в смешанном состоянии как с позиций ансамбля вихревых линий, так и с использованием флуктуаций параметра порядка являются двумя различными подходами при объяснении одного и того же физического явления — исчезновения дальнего порядка в сверхпроводящей системе в магнитном поле при температуре ниже критической.

В работах [4–6] показано, что замерзание вихревой жидкости и переход в вихревое стекло (т.е. в разупорядоченную вихревую решетку) в дефектных сверхпроводящих кристаллах происходит путем непрерывного фазового перехода второго рода точно так же, как и формирование вихревой решетки при H_{c2} . С другой стороны, обнаружено, что при отсутствии пиннинга и при учете тепловых флуктуаций плавление вихревой решетки является термодинамическим переходом первого рода [11].

Наличие слоистой структуры в ВТСП приводит к дополнительному усложнению фазовой диаграммы. В слоистых материалах плавление вихревой решетки осуществляется двумя независимыми стадиями: переходом вихревой решетки в жидкость вихревых линий (линия плавления $T_m(H)$) и потерей когерентности между слоями в пределах одной вихревой нити — «decoupling» переход (линия потери когерентности $T_{dc}(H)$) [12–14]. Кроме того, переход вихревой жидкости в двумерные вихревые «блины» ($3D$ – $2D$ переход) может быть также переходом второго рода [14]. В зависимости от величины остаточного или наведенного пиннинга соотношение между фазами может иметь самый разнообразный характер. Под остаточным пиннингом понимаются естественные дефекты сверхпроводника, образовавшиеся при его создании, а под наведенным — дефекты, вызванные внешним воздействием на сверхпроводник (облучением, давлением и т.д.). Линии на фазовой диаграмме, ограничивающие области вихревой решетки, вихревого стекла, вихревой жидкости, и линии потери когерентности между слоями могут сдвигаться относительно друг друга, совпадать и даже пересекаться.

Структура различных вихревых состояний и природа фазовых переходов между ними стала одним из центральных вопросов физики смешанного состояния, привлекая серьезное внимание исследователей [15–19].

Экспериментальное доказательство того, что процесс плавления решетки является переходом первого рода, первоначально было получено из наблюдений излома на кривой резистивного перехода в магнитном поле в чистом кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (YBCO) [20–25]. Несмотря на четкость и ясность проведенных экспериментов, их трактовка вызывает определенное сомнение, так как сопротивление является динамической характеристикой материала и соответственно по нему нельзя оценить характер перехода между различными термодинамическими фазами. Истинный фазовый переход первого рода должен иметь термодинамические характеристики: скрытую теплоту и скачок удельного объема или плотности, что было экспериментально продемонстрировано в [26]. В проведенном эксперименте с помощью серии миниатюрных датчиков Холла были выполнены локальные измерения магнитной индукции в чистом монокристалле $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ и показано, что в области низких полей $H < 380$ Гс наблюдается скачок локальной плотности вихрей, являющейся термодинамической величиной. Этот скачок был интерпретирован авторами как дока-

зательство того, что плавление вихревой решетки происходит как фазовый переход первого рода. Исходя из этого была определена линия плавления чистого монокристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ и обнаружено существование критической точки, выше которой по полю скачок плотности вихрей пропадает. Аналогичную критическую точку наблюдали и в экспериментах с YBCO [25]. Возможная причина появления критической точки на линии плавления вихревой среды заключается в воздействии на вихревые линии остаточного беспорядка или пиннинга. В результате размер трансляционных корреляций в вихревой решетке Абрикосова оказывается реально ограниченным некоторым максимальным размером, определяемым степенью беспорядка [27].

Последующие работы [28–30] подтвердили наличие скачка магнитной индукции, зарегистрированного уже не только в локальных, но в макроскопических измерениях намагниченности [26,31,32].

Термодинамическое доказательство наличия фазового перехода первого рода было также получено в монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ из измерений равновесной намагниченности [33,34]. Кроме того, в недавнем сообщении [35] на примере монокристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ показана идентичность результатов, полученных из резистивных и магнитных измерений, проведенных одновременно и демонстрирующих фазовый переход первого рода.

Однако в [27], не отрицая факта скачка магнитной индукции, ставится под сомнение вывод об имеющемся плавлении вихревой решетки. Автор [27] считает, что скачок не является убедительным доказательством именно плавления решетки, так как наблюдаемый скачок находится в обратимой области кривой намагниченности. Кроме того, линия плавления отделена от линии обратимости, которая в этом режиме определяется барьером Бина–Ливингстона, а не депиннингом. Таким образом, в [27] утверждается, что скачок плотности магнитной индукции относится не к плавлению, а к переходу «decoupling», но также является переходом первого рода.

Прямое наблюдение плавления вихревой решетки (без обсуждения типа фазового перехода) продемонстрировано с помощью малоуглового нейтронного рассеяния [36]. Было показано исчезновение дифракционных пиков при значениях значительно ниже $H_{c2}(T)$. Результаты соответствуют критерию плавления Линдемана с параметром $C_L = 0,15$.

Сложности аналитического изучения фазовой диаграммы вихревой структуры, основанные как на критерии плавления Линдемана, так и на других физических подходах (см., например, [4,37,38]), отсутствие последовательной теории плавления, необходимость учета большого количества внешних факторов диктуют необходимость интенсивного использования численных методов, в том числе метода Монте-Карло [39–47].

1. Моделирование решетки вихрей

Для исследования поведения решетки абрикосовских вихрей в ВТСП с помощью компьютерного моделирования в большинстве случаев используется метод Монте-Карло (МК) [41–51]. При этом применяется стандартный алгоритм Метрополиса [52]. Функционал Гинзбурга–Ландау обычно представляется как гамильтониан взаимодействующих частиц (обоснование такого подхода можно найти, например, в [53]).

В случае двумерной задачи (2D задачи) вихри представляются классическими частицами с дальним взаимодействием на плоской сетке. Так, в [41–43,45,47–49] при моделировании двумерных вихревых систем использовался следующий эффективный гамильтониан:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (n_i - f)(n_j - f) V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (1)$$

где суммирование проводится по дискретной сетке, позиции i которой могут быть пустыми ($n_i = 0$) или содержать вихрь ($n_i = 1$) [41,43,45,48] или в моделях решеточного кулоновского газа антивихрь ($n_i = -1$) [47,49]. Здесь f — плотность фонового заряда, она имеет вид

$$f = (\sqrt{3} a_0^2 / 2) (B / \Phi_0),$$

где B — магнитное поле; $\Phi_0 = 2,0679 \cdot 10^{-15}$ Тл·м² — квант магнитного потока; a_0 — постоянная треугольной решетки; $V(\mathbf{r})$ — решеточный двумерный потенциал (2D потенциал), являющийся решением уравнения

$$\Delta_{x,y} V(\mathbf{x}) = -2\pi\delta_{x,0} \quad (2)$$

с $V(\infty) = 0$ [48].

При моделировании слоистого сверхпроводника рассматривается система параллельных плоскостей, которые пронизывают вихревые нити. В каждой плоскости задача ставится так же, как в двумерном случае. Для сверхпроводящих слоев предполагают, что в пределах вихревой линии вихревые точки взаимодействуют только с двумя

ближайшими соседями выше и ниже рассматриваемой точки в плоскости. Авторы работ [41,43] при моделировании слоистой системы пользовались следующим потенциалом:

$$V_i^{z,z+1} = \begin{cases} U_0 \left[\frac{|r_i^{z,z+1}|}{r_g} - 2 \right], & |r_i^{z,z+1}| > 2r_g, \\ U_0 \left[\frac{|r_i^{z,z+1}|^2}{4r_g^2} - 1 \right], & |r_i^{z,z+1}| < 2r_g, \end{cases} \quad (3)$$

где $r_i^{z,z+1} = r_{i,z} - r_{i,z+1}$; $r_g = \xi_{ab} / \sqrt{g}$; ξ_{ab} — длина когерентности в кристаллографической плоскости ab ; $g = 1/2\pi d$; (для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ (BSCCO)); безразмерная энергия взаимодействия между слоями $U_0 = (T_0 a / \pi d) [1 + \ln(\lambda_{ab} / a)]$, где $a = 12,3 \text{ \AA}$ — расстояние между уровнями; $d = 2,7 \text{ \AA}$ — толщина сверхпроводящего слоя; λ_{ab} — глубина проникновения магнитного поля в плоскости ab ; T_0 — коэффициент при потенциале взаимодействия.

Типичные исследуемые вихревые системы обычно состоят из 100–1 000 вихрей. Причем при дальнейшем увеличении количества вихрей возрастает время счета задачи, которое, однако, гораздо меньше по сравнению с другими методами, например с методом молекулярной динамики (ММД). С другой стороны, уменьшение внешнего магнитного поля приводит к уменьшению количества абрикосовских вихрей в системе, а значит к уменьшению их плотности, что затрудняет использование метода МК из-за малого взаимодействия вихревых точек и диктует использование других методов, в том числе ММД.

При моделировании вихревых систем с помощью метода МК применяются два основных приема. В первом за начальное состояние системы берется абрикосовская решетка. Моделирование проводится при фиксированной температуре и определенном количестве МК-шагов [42,43,45,51]. Другой подход заключается в моделировании охлаждения разупорядоченной системы вихрей [45,51]. Стартуя с неупорядоченной системы вихрей, температура системы через определенное количество шагов понижается (например, через 15 000 шагов на 1 К [45]). Результаты таких численных экспериментов используются для определения температуры, при которой решетка разупорядочивается. Сравнивая результаты первого и второго подходов, можно уточнить температуру плавления.

Как оказалось, термализация системы после случайного разброса вихрей происходила после 5 000–10 000 МК-шагов [41–51].

2. Параметры и характеристики решетки вихрей. Эксперимент и моделирование

2.1. Распределение магнитного поля в вихре, структура вихря. Радиус взаимодействия вихрей

Решение краевой задачи (2) выглядит следующим образом [43,48]:

$$V_{ij}^z = T_0 K_0 \left(\frac{|r_{i,z} - r_{j,z}|}{\lambda_{ab}} \right), \quad (4)$$

где $T_0 = \Phi_0 d / 2\pi\lambda_{ab}^2 \mu_0$; $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ В}\cdot\text{с}/\text{А}\cdot\text{м}$; $d = 2,7 \text{ \AA}$ — толщина сверхпроводящего слоя; $\Phi_0 = 2,0679 \cdot 10^{-15} \text{ Тл}\cdot\text{м}^2$ — квант магнитного потока; $\lambda_{ab}(T) = \lambda_{ab}(0)[1 - (T/T_c)^n]^{-1/2}$, где обычно выбирается $n = 3,3$ (согласно эксперименту); T_c — критическая температура; $K_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя.

Поскольку энергия взаимодействия вихрей резко убывает с расстоянием, вводят радиус эффективного взаимодействия вихрей. Обычно он выбирается равным трем–десяти межклеточным расстояниям равновесной треугольной решетки, что, с одной стороны, позволяет получать результаты за разумное время и, с другой стороны, корректно учитывает взаимодействие вихрей.

2.2. Равновесное состояние решетки вихрей

Очевидно, что все модельные подходы должны удовлетворять основному тесту для вихревой решетки: через достаточное время счета — время термализации — система вихрей должна выстроиться в регулярную треугольную решетку Абрикосова [1] с решеточной постоянной [41,43,48]

$$a_0 = \left(\frac{2\Phi_0}{\sqrt{3}B} \right)^{1/2}.$$

В [44,51] отмечается, что время прихода системы к равновесию (т.е. к треугольной решетке) зависит от количества внесенных дефектов (центров пиннинга), удерживающих решетку, а также от их силы. Так, например, при умеренном пиннинге наблюдается эффект термического движения вихрей на расстояния $\sim a_0$ (постоянная треугольной решетки), не зависящий от количества центров пиннинга.

Вихревая система может выстроиться и в четырехугольную решетку. Отметим, однако, что энергии четырех- и треугольных вихревых решеток совпадают для систем, содержащих около 200 вихрей [45]. Из этого делается вывод, что, поскольку эти вихревые решетки имеют близкие

энергии, их температуры плавления также мало различаются. Кроме того, в вихревых системах всегда наблюдается некоторая смесь этих структур [45].

2.3. Структурный фактор. Параметр порядка

Для исследования плавления двумерной решетки вихрей обычно вычисляется следующая величина [41]:

$$\Psi_6 \propto \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{Z_i} \sum_{j=1}^{Z_i} e^{i6\theta_{ij}(r_j)} \right\rangle, \quad (5)$$

θ_{ij} — угол между ближайшими соседями; Z_i — координационное число для i -го вихря; N — число вихрей в системе.

Подобный ориентационный параметр корреляции (sixfold orientational order correlation) используется и в других работах [48]. Резкое изменение (уменьшение) Φ_6 свидетельствует о нарушении регулярности вихревой решетки и переходе в состояние вихревой жидкости.

Кроме того, рассматривается структурный фактор вида [48]

$$S(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{N} \langle n_k n_{-k} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle n_i n_j \rangle, \quad (6)$$

где $n_k = \sum_i n_i \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i)$.

Из определения параметра Φ_6 в (5) и структурного фактора $S(k)$ в (6) следует, что фактор $S(k)$ должен резко уменьшаться при нарушении дальнего порядка, в то время как Φ_6 чувствителен также и к потере ближнего порядка. Поэтому по мере повышения температуры различают две фазы плавления [48]:

- 1) сначала $S(k) \rightarrow 0$, а $\Phi_6 \neq 0$;
- 2) затем при $T = T_m$ параметр $\Phi_6 \rightarrow 0$.

Фаза 1) — дрейфующая решетка — некое однородное состояние решетки с близким порядком. Температура плавления T_m ниже T_c . Таким образом, существует фаза в интервале $T_m < T < T_c$. Это область, где при наличии пиннинга вихри еще присутствуют, но полностью разупорядочены. В этом смысле такое фазовое состояние нестабильно и при отсутствии центров пиннинга переходит в нормальное, т.е. в чистом сверхпроводнике $T_c \equiv T_m$.

На рис. 1 показаны зависимости $\Phi_6(T)$ и $\epsilon^{-1}(T)$ (ϵ — диэлектрическая проницаемость, рассчитывается из $S(k)$) [48], для системы с $N = 63$ и $f = 1/49$ при трех различных температурах:

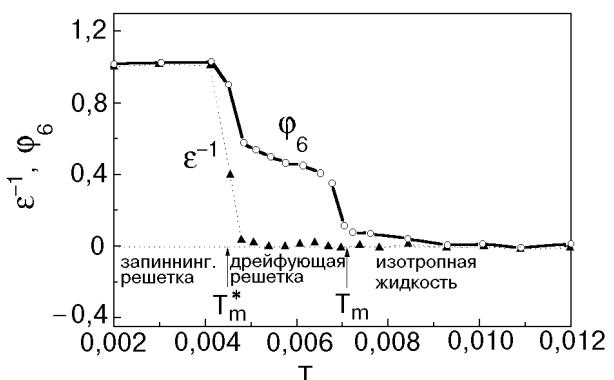


Рис. 1. Зависимости обратной диэлектрической постоянной и параметра корреляции от нормированной температуры при $f = 1/49$ и $N_c = 169$ [48].

$T = 0,003$ (ниже T_m^*), запиннигованная решетка, $T = 0,0065$ (ниже T_m), дрейфующая решетка, $T = 0,0075$ (выше T_m), жидкость.

При низких температурах ($T < T_m$) и умеренных полях ($B < B_{2D}$), вихревые «блины», как полагают, выстраиваются в близкую к идеальной абрикосовской решетке (Φ_6 близко к единице), а при температурах выше T_m параметр Φ_6 близок к нулю [43].

2.4. Теплоемкость решетки вихрей

Еще одной наглядной характеристикой точки фазового перехода может быть теплоемкость. Очевидно, что точка плавления вихревой решетки должна характеризоваться особенностями температурной зависимости теплоемкости C . Наиболее удобно рассчитывать теплоемкость, используя флуктуационно-диссипативную теорему [45]

$$C(T) = (1/k_B^2 T^2)(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (7)$$

где T — температура в градусах Кельвина; E — энергия системы; k_B — постоянная Больцмана.

Результаты моделирования методом МК двумерной системы вихрей в отсутствие пиннинга с полем 1 Тл [45] показывают, что имеется пик теплоемкости системы, который тем острее, чем больше вихрей в системе (моделировались системы из 108, 243 и 300 вихрей).

Если определить T_m как температуру, при которой $C(T)$ имеет максимум, то T_m мало изменяется с ростом числа вихрей [45], т.е. система достаточно велика и изменение числа вихревых точек не влияет на измеряемые величины.

2.5. Подвижность вихрей

Для выяснения возможности плавления решетки вихрей в 2D системе используется критерий Линдемана, согласно которому плавление решет-

ки происходит тогда, когда среднеквадратичное отклонение σ_{TM} становится равным приблизительно одной десятой расстояния a_0 равновесной решетки вихрей [45].

Среднеквадратичное отклонение вихрей σ_{TM} как величина смещения вихря от своего начального положения дается формулой [45]

$$\sigma_{TM} = \left[\sum_{i=1}^N \frac{(r_{if} - r_{is})^2}{N} \right]^{1/2}, \quad (8)$$

где r_{is} — начальная позиция вихря; r_{if} — конечное положение вихря; N — число вихрей в системе.

Согласно расчетам [45], при температуре $T < T_m$ ($T_m = 18,5$ К) движение вихрей мало, при $T \sim T_m$ величина отклонения σ_{TM} быстро растет, т.е. происходит плавление решетки. Также при росте числа вихрей в системе термическое движение увеличивается при $T \sim T_m$ (поле $H = 1$ Тл) и практически не изменяется при более низкой температуре.

Интересно проследить влияние пиннинга на движение вихрей. Так, обнаружено различие поведения решетки вихрей при среднем и сильном пиннинге [44]. В случае умеренного пиннинга авторы [44] нашли, что плотность центров пиннинга мало влияет на термическое движение, так что σ_{TM} имеет величину порядка a_0 , не зависящую от числа дефектов. В случае сильного пиннинга σ_{TM} имеет минимум при $N_{pin} \approx N_{vor}/4$ (N_{pin} — число дефектов, N_{vor} — число вихрей) и максимум при N_{pin} в области от $N_{vor}/2$ до N_{vor} . Уменьшение термической подвижности при $N_{pin} = N_{vor}/4$ объясняется в [44] тем, что пиннингованные позиции приблизительно совпадают с вихревой решеткой. При увеличении числа пиннингующих дефектов происходит образование кластеров дефектов, которые захватывают вихри на расстояниях меньших, чем в непиннингованной решетке. При этом образуются каналы на поверхности потенциальной энергии системы, через которые непиннингованные вихри могут дифундировать. Авторы [44] делают следующие выводы: концентрация дефектов $N_{pin} \approx N_{vor}/4$ стабилизирует решетку, при $N_{vor}/4 < N_{pin} < N_{vor}$ происходит ломка решетки и инициация дифузии, при $N_{vor} \ll N_{pin}$ — подавление движения вихрей и решеточной структуры.

3. Фазовые диаграммы (вихревая решетка, «стекло», вихревая жидкость, потеря когерентности между слоями)

3.1. Плавление вихревой решетки в 2D системе

В связи с квазидвумерностью и слабым межплоскостным взаимодействием в слоистых сверхпроводниках интенсивно исследуются двумерные системы. Так, в работах [44,45,48–50] проводилось моделирование 2D решетки вихрей методом МК.

В [48] обнаруженный переход в 2D системе (плавление решетки) определен как *слабый переход первого рода*. Исследуемая система имела две характерные температуры: T_m^* и T_m . Температура T_m^* определялась из зависимости диэлектрической функции от температуры: при T_m^* она обращается в нуль. Температура T_m — из обращения в нуль функции ориентационной корреляции $\Phi_6(T)$. Как уже отмечалось в разд. 2.3, в рассматриваемой системе $T_m^* < T_m$, при $T < T_m^*$ решетка запиннигована, при $T_m^* < T < T_m$ решетка дрейфует, при $T > T_m$ происходит плавление решетки. Изменение свободной энергии ΔF линейно растет с увеличением линейного размера системы L , поэтому авторы [48] делают вывод, что в системе происходит переход первого рода.

В [45] определена температура плавления 2D решетки вихрей (17 К) по пику теплопроводности решетки, а также из поведения корреляционной функции и термического движения вихрей.

При моделировании двумерного решеточного газа в [49] было установлено, что переход плавления решетки является переходом первого рода; в [50] исследовался переход вихревой жидкости в вихревое твердое тело, в [44] обнаружен также переход в жидкое состояние в системе при 18 К.

3.2. Переход плавления, фаза вихревого стекла

В [41–43,54,55] исследовалось плавление в 3D системе вихрей. На рис. 2,а [41] приведена фазовая диаграмма системы 64 вихревых линий, моделированной методом МК в области магнитных полей $12,5$ Гц $\leq B \leq 5 \cdot 10^2$ кГц. На рис. 2,б показан режим очень малых плотностей (16 линий). Параметры для МК-моделирования были взяты для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_8$. Получены две кривые фазового перехода. Кривые (1) были определены из исчезновения трансляционного порядка в плоскости $S(q = G_1)$, которая является фурье-образом функции корреляции плотность-плотность на границе зоны Бриллюэна. Эта зависимость имеет резкие максимумы в твердой фазе, отражающие наличие дальнего порядка в системе. Напротив, в

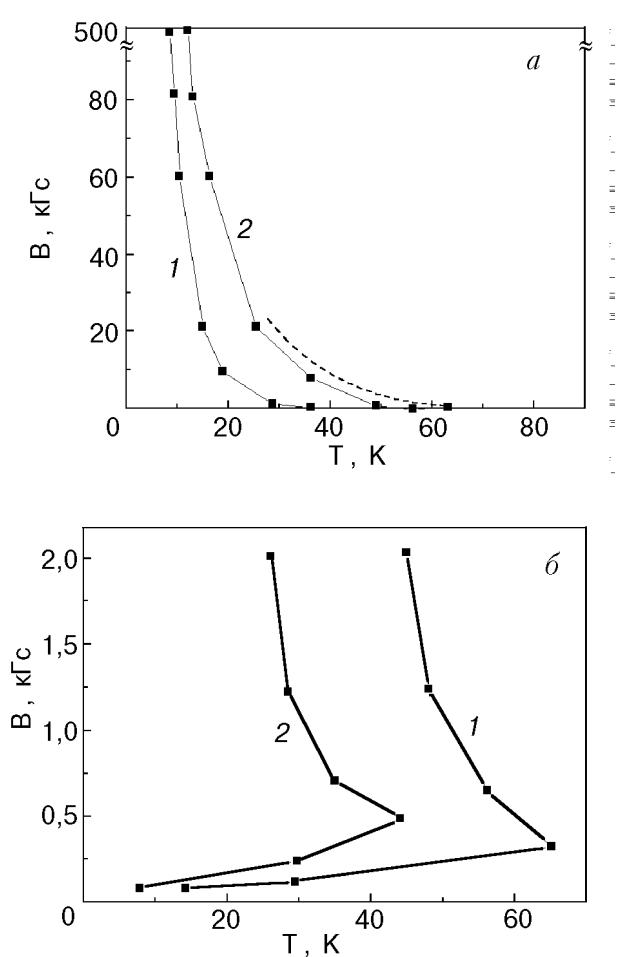


Рис. 2. Фазовая диаграмма B - T при $12,5$ Гц $\leq B \leq 5 \cdot 10^2$ кГс [41]. Пунктирная линия — теоретические результаты (а). Режим малых плотностей (б).

жидкой фазе структурный фактор не имеет максимумов и достигает насыщения (при температуре T_m). Кривые 2 получены из такого же анализа гексагонального параметра порядка Φ_6 . Плавление проходит в два этапа подобно тому, как это происходит при плавлении $2D$ системы. Асимптотика этой кривой при больших температурах — $2D$ предел. При низкополевом режиме межплоскостное взаимодействие относительно сильное (сильнее, чем корреляции в плоскости). В результате такого поведения система содержит прямые вихревые линии, которые формируют «хрупкую» решетку. При малой плотности вихрей авторы обнаружили эффект пересоединения вихревых линий: в пределах модели связанных плоскостей вихри могут переключать связи, стремясь к более низкой энергии системы.

Для наблюдения плавления вихревой решетки в [43] вычислялся гексагональный параметр порядка Ψ_6 и среднеквадратичное отклонение вихревого «блока» от средней позиции. Для системы

из $8 \times 8 \times 16$ вихрей при $B = 45$ мТл была найдена температура плавления вихревой решетки $T_m \approx 60$ К (в эксперименте $T_m = 57$ К). Также было рассчитано распределение магнитного поля при трех различных ситуациях: а) $T = 10$ К, $B = 45$ мТл, $\Psi_6 \approx 1$ (фаза $3D$ вихревых линий); б) $T = 80$ К, $B = 45$ мТл, $\Psi_6 \approx 0$ (жидкая фаза); в) $T = 5$ К, $B = 90$ мТл (система без корреляции между слоями, но с абрикосовской решеткой в плоскостях, соответствующих $2D$ фазе). Данные хорошо согласуются с экспериментом для образцов BSCCO.

Авторы [54] также изучали переход при плавлении и зависимость $T_m(H)$. Исследование проводилось методом МК при $k \gg 1$ (k — параметр Гинзбурга — Ландау): (при $k = 52$, $T_{c0} = 93$ К моделировался YBaCuO). Количество вихрей составляло 100, 10 слоев, $H = 50$ кЭ. Детальное сравнение с экспериментом показало неплохое соответствие с результатами моделирования. Переход определялся по параметру $S(q)$, и при $T = 82,8$ К получено состояние вихревого твердого тела, при $T = 83,0$ К — вихревая жидкость, т.е. при $T_m \approx 83$ К и $H = 50$ кЭ происходит переход, и переход именно первого рода.

Известно, что теория Абрикосова предсказывает переход второго рода для однородного сверхпроводника второго рода в магнитном поле. В [55] отмечается, что сильные флуктуации в сверхпроводниках второго рода могут изменять порядок перехода, и установлено, что плавление вихревой решетки в сильном сверхпроводнике второго рода ($k \gg 1$) в магнитном поле является переходом первого рода. Величины констант взяты для YBaCuO. Диапазон исследуемых полей 0,1–10 Тл. Результаты исследований в [55] подтверждают, что переход вихревой решетки жидкость—твердое тело в однородном сверхпроводнике второго рода является переходом первого рода.

Линия перехода при плавлении на фазовой диаграмме может смещаться при введении в систему точечных или столбчатых дефектов вследствие закрепления на них вихревых «блоков» или полностью вихревых линий, так что образуется фаза «вихревое стекло». В [51] методом МК исследовалось влияние взаимодействия и энергии пиннинга в фазе вихревого стекла, также рассматривались низкотемпературные возбуждения вихрей, «замороженных» на столбчатых дефектах в сверхпроводниках, с учетом дальнего взаимодействия между вихрями.

3.3. Переход 2D–3D

В слоистом материале вихревые линии состоят из отдельных «блинов» и взаимодействие между «блинами» вдоль параллельных слоев относительно слабое [56]. Случайное смещение «блинов» может подавлять межслойную когерентность, термические флуктуации «блинов» также могут являться причиной этого, причем при температурах значительно ниже температуры перехода при плавлении вихревой решетки. Данное нарушение когерентности может быть описано с точки зрения экспоненциально сильной температурной зависимости критического тока в направлении *c* (перпендикулярно слоям). При достаточно низких температурах вихревые «блины» в различных слоях выравниваются, если беспорядок отсутствует, и межслойная когерентность восстанавливается. Неоднородности материала создают случайный потенциал, который управляет смещениями «блинов» даже при $T = 0$, такие вызванные беспорядком смещения также подавляют фазовую когерентность между слоями. В [56] рассматривается влияние относительно слабого пиннинга на джозефсоновские связи между слоями и на случайное блуждание вихревых линий.

В некоторых экспериментальных работах предполагается и важность пиннинга для межслойной связи в слоистых ВТСП [57–61].

В [62] исследовалась устойчивость вихревой линии как стопки вихревых «блинов» относительно поперечных смещений.

При моделировании методом МК 3D системы вихревых линий выделяют следующие состояния системы [41, 43]: 3D фаза, жидккая фаза и 2D фаза. В [41], кроме того, исследовался уже упоминавшийся в разд. 3.2 эффект пересоединения связей между вихрями в разных плоскостях. В [57] показано, что 2D–3D переход является переходом второго рода.

4. Влияние дефектов на решетку вихрей

Как было отмечено в [44], ввод дефектов в систему влияет на подвижность вихрей в плоскости. Замечено, что дефекты с силой пиннинга от слабой до умеренной мало влияют на плавление системы. В случае сильного пиннинга вихревая структура стабилизируется даже очень незначительным числом пиннингующих центров, примерно $N_{\text{pin}} < N_{\text{vor}}/4$. Причем, как утверждают авторы [44], увеличение числа дефектов до $N_{\text{vor}}/2$ приводит к возникновению диффузии вихрей в системе.

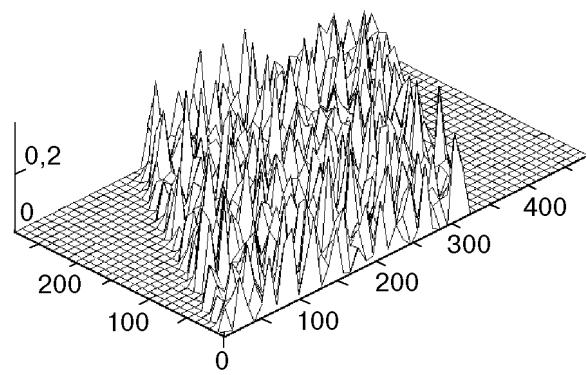


Рис. 3. Распределение вихревых линий в треугольной решетке при $B = 100$ мТл, $T = 5$ К, число пиннингующих центров $N_{\text{imp}} = 10$ при $U = -0,005$ эВ.

В работе [63] методом МК исследовалось поведение двумерной вихревой системы в присутствии дефектов. Вихри рассматривались как безмассовые классические частицы с дальним отталкивающим взаимодействием. Пиннинг был представлен конечным числом случайно распределенных потенциальных ям с короткодействующим притяжением. Исследовалось поведение систем с числом вихревых точек 100–225, распределенных по квадратной сетке размерами 450×390 или по треугольной сетке размерами 320×320 ячеек. Использовались периодические граничные условия. Параметры моделирования были типичными для слоистых ВТСП. Для наблюдения за плавлением вихревой решетки вычислялся гексагональный параметр порядка S_6 . Было обнаружено, что значение S_6 близко к единице в случае почти идеальной абрикосовской решетки и равно нулю при температурах выше температуры плавления вихревой решетки. Также было выяснено, что пиннинг сдвигает температуру плавления и изменяет фазовую диаграмму. На рис. 3 приведена типичная структура вихревой решетки при низкой температуре после $4 \cdot 10^4$ МК-шагов, на рис. 4, *a, b, e* показана динамика вихревой решетки при различных температурах. Темные пятна указывают на области вблизи пиннингующих центров, где вихревые «блины» нестабильны. Четкие точки указывают на вихревые «блины», находящиеся вдали от центров пиннинга. Видно, что при высокой температуре вихревая решетка разрушается и вихри не чувствуют пиннингующих сил. На рис. 5 представлены температурные зависимости S_6 при различном числе центров пиннинга. Кроме того, следует заметить, что температура перехода (плавления) понижается с возрастанием концентрации центров пиннинга, что соответствует сдвигу границы фаз на B – T -диаграмме.

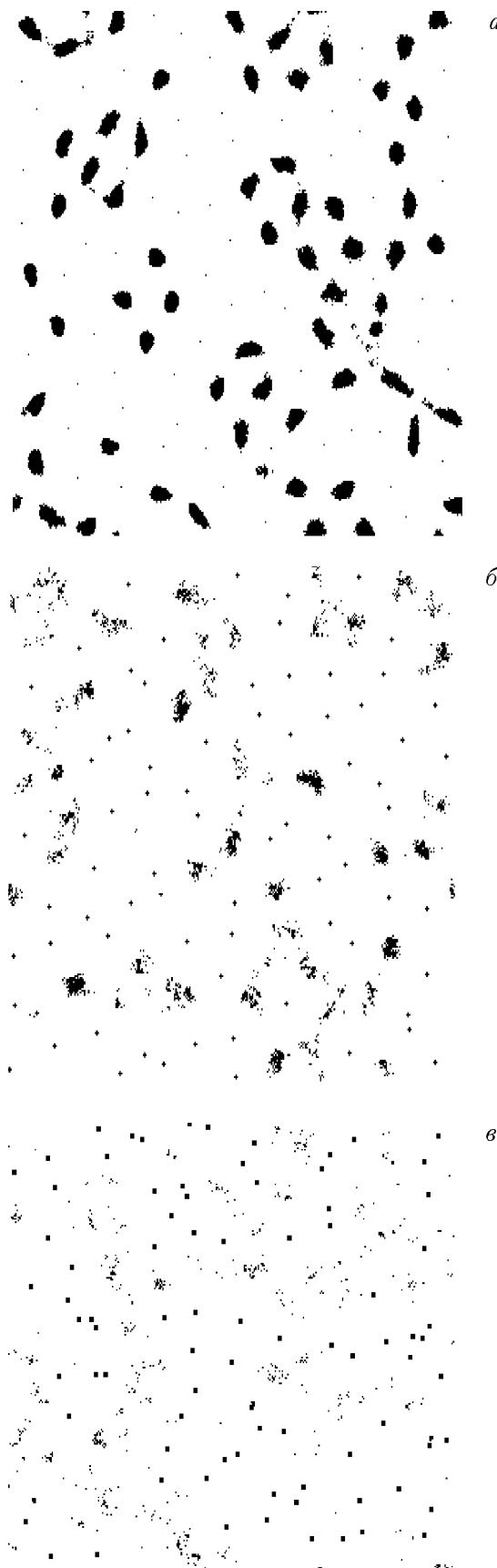


Рис. 4. Температурная эволюция решетки вихрей в квадратной сетке с числом пиннингующих центров $N_{\text{imp}} = 100$ при $B = 450$ Гс и различных температурах T , К: 5 (а), 30 (б), 50 (в).

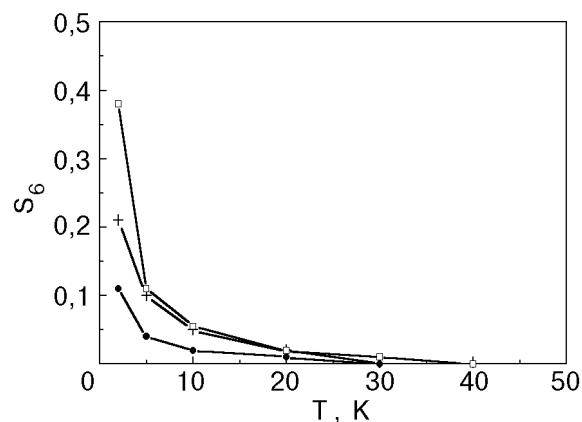


Рис. 5. Гексагональный параметр S_6 как функция температуры для квадратной сетки после $3 \cdot 10^4$ МК-шагов при $B = 450$ Гс и различном числе пиннингующих центров N_{imp} : 0 (●); 25 (+); 100 (□). Пиннингующий потенциал $U = -0,1$ эВ.

В идеальном слоистом сверхпроводнике при низкой температуре вихревые «блины» в различных слоях выравнены. В [56] рассматривается ситуация, при которой точечные дефекты порождают случайный потенциал, действующий на каждый вихрь, что приводит к разрушению вихревых линий.

Авторы [64] исследовали закрепление вихрей на столбчатых и точечных дефектах, а также динамику ступенчатых вихрей.

Изучалось также [51] поведение системы вихрей в фазе «вихревого стекла». Рассматривалась ситуация, когда каждая вихревая линия присоединяется к одному из дефектов, в то время как некоторые дефекты остаются незанятыми. Эту фазу ассоциируют с фазой бозе-стекла, известного из моделирования бозе-систем с дефектами [65]. В [51] исследуется также случай, когда вихрь зацепляется за два ближайших столбчатых дефекта. Описание такой системы при низкой температуре [51] можно свести к решеточному квантовому бозе-газу с так называемой «hard-core» статистикой: бозоны на разных узлах обладают симметричной функцией, а на одном — принципом Паули, т.е. фермационной статистикой [66]. Тогда фазовый переход пиннингованная решетка — движущаяся решетка будет эквивалентен известному переходу моттовский диэлектрик—сверхтекучесть для бозе-газа [67].

Заключение

Разнообразность фазовой картины вихревого состояния ВТСП, сложность изучаемых слоистых сильнокоррелированных структур и отсутствие строгих аналитических подходов диктуют необходимость интенсивного исследования эффективны-

ми численными методами фазовых переходов вихревой решетки. Представленные в обзоре результаты численного моделирования методом Монте-Карло позволяют в ряде случаев удовлетворительно описать известные экспериментальные факты, получить фазовые диаграммы и важные характеристики системы (вплоть до их численного значения!).

В заключение следует отметить ряд проблем, которые можно было бы предложить как темы дальнейших исследований в области моделирования вихревой решетки ВТСП и экспериментального изучения смешанного состояния. Так, весьма актуально было бы проведение экспериментов, показывающих изменение линии плавления и положения критической точки при создании беспорядка. Следовало бы провести расчет фазовых диаграмм вихревого состояния при разных степенях беспорядка, определить состояние системы выше точки плавления вихревой решетки, исследовать область малых полей и температур, где также может происходить плавление вихревой решетки, и, наконец, очень важно было бы провести адекватный расчет вольт-амперных характеристик (см. недавно появившиеся работы, посвященные исследованию вольт-амперных характеристик вихревой системы в присутствии дефектов [68, 69]), отражающих динамику вихревого состояния в областях фазовой диаграммы, соответствующих состоянию вихревого кристалла, стекла и жидкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российской научно-технической программы «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», направление «Сверхпроводимость», проекты №№ 95019, 96026.

1. А. А. Абрикосов, *ЖЭТФ* **8**, 1174 (1957).
2. D. J. Bishop, P. L. Gammel, L. F. Schineemeyer, and J. V. Waszczak, *Bull. Am. Phys. Soc.* **33**, 606 (1988).
3. D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1973 (1988).
4. G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
5. M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1415 (1989).
6. D. S. Fisher, M. P. A. Fisher, and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **43**, 130 (1991).
7. А. И. Лarkin, *ЖЭТФ* **31**, 784 (1970).
8. V. M. Vinokur, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, and A. I. Larkin, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 259 (1990).
9. В. А. Марченко, А. В. Никулов, *Письма в ЖЭТФ* **34**, 19 (1981).
10. А. В. Никулов, *Phys. Rev. B* **52**, 10429 (1995).
11. E. Brezin, D. R. Nelson, and A. Thiaville, *Phys. Rev. B* **31**, 7124 (1985).
12. M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, and A. I. Larkin, *Physica* **C167**, 177 (1990).
13. L. I. Glazman and A. E. Koshelev, *Phys. Rev. B* **43**, 2835 (1991).
14. L. L. Daemen, L. N. Bulaevskii, M. P. Maley, and J. Y. Couter, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1167 (1993); *Phys. Rev. B* **47**, 11291 (1993).
15. D. A. Huse, M. P. A. Fisher, and D. S. Fisher, *Nature* **358**, 553 (1992).
16. D. J. Bishop, P. L. Gammel, D. A. Huse, and V. A. Murray, *Science* **255**, 165 (1992).
17. R. Cubitt, E. M. Forgan, G. Yang, S. L. Lee, D. McK. Paul, H. A. Mook, M. Yethiraj, P. H. Kes, T. W. Li, A. A. Menovsky, Z. Tarnawski, and K. Mortensen, *Nature* **365**, 407 (1993).
18. Р. Батто, Л. Я. Винников, Л. А. Гуревич, М. В. Дугаев, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 139 (1995).
19. Г. М. Генкин, А. В. Окомельков, *ЖЭТФ* **107**, 784 (1995).
20. H. Safar, P. L. Gammel, D. A. Huse, D. J. Bishop, J. P. Rice, and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 824 (1992).
21. W. K. Kwok, S. Fleshler, U. Welp, V. M. Vinokur, J. Downey, G. W. Crabtree, and M. M. Miller, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3370 (1992).
22. W. K. Kwok, J. Fendrich, S. Fleshler, U. Welp, J. Downey, and G. W. Crabtree, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1092 (1994); U. Welp, J. Fendrich, W. K. Kwok, G. W. Crabtree, and B. W. Veal, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4809 (1996); J. Fendrich, U. Welp, W. K. Kwok, A. E. Koshelev, G. W. Crabtree, and B. W. Veal, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2073 (1996).
23. M. Charalambous, J. Chaussy, P. Lejay, and V. Vinokur, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 436 (1993).
24. W. Jiang, N.-C. Yeh, D. S. Reed, U. Kriplani, and F. Holtzberg, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1438 (1994).
25. H. Safar, P. L. Gammel, D. A. Huse, D. J. Bishop, W. C. Lee, J. Giapintzakis, and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3800 (1993).
26. E. Zeldov, D. Majer, M. Konczykowski, V. B. Geshkenbein, V. M. Vinokur, and H. Shtrikman, *Nature* **375**, 373 (1995); U. Welp, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4809 (1996).
27. D. R. Nelson, *The Vortex State 41–61*, Kluwer, Dordrecht (1994); D. R. Nelson, *Nature* **375**, 356 (1995).
28. E. Zeldov, D. Majer, A. I. Larkin, V. B. Geshkenbein, H. Shtrikman, M. Konczykowski, V. M. Vinokur, and N. Chikumoto, *Europhys. Lett.* **30**, 367 (1995).
29. D. Majer, E. Zeldov, and M. Konczykowski, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1166 (1995).
30. D. Majer, B. Khaykovich, T. W. Li, M. Konczykowski, E. Zeldov, and P. H. Kes, *Czech. J. Phys.* **46**, Suppl. S3, 1563 (1996).
31. T. Hanaguri et al., *Physica* **C256**, 111 (1996).
32. T. Hanaguri, T. Tsuboi, A. Maeda, Y. Kotaka, J. Shimoyama, and K. Kishio, *Czech. J. Phys.* **46**, Suppl. S3, 1559 (1996).
33. R. Liang, D. A. Bonn, and W. N. Hardy, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 835 (1996).
34. T. Nishizaki, Y. Onodera, N. Kobayashi, H. Asaoka, and H. Takei, *Phys. Rev. B* **53**, 82 (1996).
35. D. T. Fuchs, E. Zeldov, D. Majer, R. A. Doyle, T. Tamagai, S. Ooi, and M. Konczykowski, *Czech. J. Phys.* **46**, Suppl. S3, 1583 (1996).
36. M. T. Wylie, E. M. Forgan, S. Lloyd, S. Lee, R. Cubitt, M. Yethiraj, and H. A. Mook, *Czech. J. Phys.* **46**, Suppl. S3, 1569 (1996).
37. H.-R. Ma and S. T. Chui, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 505 (1991).
38. S. Sengupta, C. Dasgupta, H. R. Krishnamurthy, G. I. Menon, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3444 (1991).

-
39. Y.-H. Li and S. Teitel, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3301 (1991).
 40. Y.-H. Li and S. Teitel, *Phys. Rev.* **B47**, 359 (1993).
 41. S. Ruy, S. Doniach, G. Deutscher, and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 710 (1992).
 42. R. E. Hetzel, A. Sudbo, and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 518 (1992).
 43. J.W. Schneider, S. Schafroth, and P. F. Meier, *Phys. Rev.* **B52**, 3790 (1995).
 44. K. Yates, D.J. Newman, and P. A. J. de Groot, *Phys. Rev.* **B52**, R13 149 (1995).
 45. K. Yates, D. J. Newman, and P. A. J. de Groot, *Physica* **C241**, 111 (1995).
 46. H. Safar, P. L. Gammel, D. A. Huse, G. B. Alers, D. J. Bishop, W. C. Lee, J. Giapintzakis, and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev.* **B52**, 6211 (1995).
 47. H. Weber, M. Wallin, and H. J. Jensen, *Phys. Rev.* **B53**, 8566 (1996).
 48. M. Franz and S. Teitel, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 480 (1994).
 49. J.-R. Lee and S. Teitel, *Phys. Rev.* **B46**, 3247 (1992).
 50. L. Xing and Z. Tesanovic, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 794 (1990).
 51. U. C. Tauber and D. R. Nelson, *Phys. Rev.* **B52**, 16106 (1995).
 52. Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*, Москва, Наука (1990).
 53. P. Minnhagen, *Phys. Rev.* **B23**, 5745 (1981).
 54. R. Sasik and D. Strous, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2582 (1995).
 55. I. F. Herbut and Z. Tesanovic, *Physica* **C255**, 324 (1995).
 56. A. E. Koshelev, L. I. Glazman, and A. I. Larkin, *Phys. Rev.* **B53**, 2786 (1996).
 57. L. L. Daemen, L. N. Bulaevskii, M. P. Maley, and J. Y. Conter, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1167 (1993); *Phys. Rev.* **B47**, 11291 (1993).
 58. J. H. Cho, M. P. Maley, S. Fleshler, A. Lacerda, and L. N. Bulaevskii, *Phys. Rev.* **B50**, 6493 (1994).
 59. E. Rodriguez, M. F. Goffman, A. Arriebere, F. de la Cruz, and L. F. Schneemeyer, *Physica* **B194–196**, 2151 (1994).
 60. O. K. C. Tsui, N. P. Ong, Y. Matsuda, Y. F. Yan, and J. B. Peterson, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 724 (1994).
 61. L. N. Bulaevskii, M. P. Maley, and M. Tachiki, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 801 (1995).
 62. M. Benkraouda and J. R. Clem, *Phys. Rev.* **B53**, 438 (1996).
 63. I. A. Rudnev, V. A. Kashurnikov, and M. A. Katargin, *Proc. of the 8th Workshop on Critical Current in Superconductors, Report Pt-15*, Japan, May 27–29 (1996).
 64. M. Machida and H. Kaburaki, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3178 (1995).
 65. M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev.* **B40**, 546 (1989).
 66. R. T. Scalettar, G. G. Batrouni, A. P. Kampf, and G. T. Zimanyi, *Phys. Rev.* **B51**, 8467 (1995).
 67. A. P. Kampf and G. T. Zimanyi, *Phys. Rev.* **B47**, 279 (1993); Б. А. Кащурников, А. И. Подливаев, Б. В. Свишунов, *Письма в ЖЭТФ* **61**, 375 (1995).
 68. K. Moon, R. T. Scalettar, and G. T. Zimanyi, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2778 (1996).
 69. S. Ryu, M. Hellerqvist, S. Doniach, A. Kapitulnik, and D. Stroud, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5114 (1996).

Monte-Carlo simulation of phase transitions in vortex system in high-temperature superconductors
(Review Article)

M. E. Gracheva, M. V. Katargin,
V. A. Kashurnikov, and I. A. Rudnev

The latest publications on the Monte-Carlo simulation of vortex systems in high-temperature superconductors are reviewed. The dependences of the basic vortex state characteristics (energy, specific heat, thermal motion, structure order parameter, etc.) on the external parameters such as temperature and magnetic field are presented. The vortex glass phase, the effect of defects on phase diagrams, and the basic phase transitions of two-dimensional and three-dimensional vortex systems — melting decoupling transition (2D–3D transition) — are also considered.