

Плавление вихревой решетки в слоистом ВТСП в поле дефектов

М. Е. Грачева, В. А. Кашурников, О. А. Никитенко, И. А. Руднев

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

Статья поступила в редакцию 26 июня 1998 г., после переработки 29 марта 1999 г.

Исследовано влияние величины потенциала дефектов на температуру плавления вихревой решетки в слоистом ВТСП. Показано, что увеличение потенциала дефектов приводит к сдвигу точки фазового перехода к критической температуре, расширяя область существования промежуточной фазы «вращающаяся решетка».

Досліджено вплив величини потенціалу дефектів на температуру плавлення вихревої ґратки у шаровому ВТНП. Показано, що збільшення потенціалу дефектів призводить до зсуву точки фазового переходу до критичної температури, що розширює область існування проміжної фази «обертова ґратка».

PACS: 02.50.+s, 74.60.Ge

1. Введение

В последнее время интенсивно изучаются процессы, происходящие в вихревой фазе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Исследования проводятся как экспериментально, так и теоретически, при этом сложность возникающих задач часто приводит к необходимости использования численного моделирования (см. обзор [1]). В настоящее время твердо установлено, что решетка Абрикосова [2] — не единственное состояние, в котором может находиться вихревая система в ВТСП. При увеличении температуры происходит плавление вихревой решетки и наблюдается фазовый переход вихревая решетка — вихревая жидкость. Убедительное доказательство существования фазового перехода было продемонстрировано, например, в работе [3], в которой численным моделированием анализировались ближние корреляции в вихревой решетке и была рассчитана температура плавления вихревой решетки. Температуру плавления (или точку плавления) можно найти из критерия Линдемманна, т.е. из сравнения величины среднеквадратичного отклонения вихрей и параметра решетки [4,5]. Удобный критерий фазового перехода был также использован в [4], где точку фазового перехода

определяли по особенности на зависимости теплоемкости вихревой системы от температуры $C(T)$.

Особый интерес представляют исследования в поле дефектов [6,7], так как при этом меняется картина фазовых превращений. Так, в недавней работе авторов [7] обсуждался вопрос о том, как происходит плавление вихревой структуры при наличии центров пиннинга. Было показано, что плавление происходит в три стадии. Вначале при низкой температуре вдали от центров пиннинга треугольная решетка начинает разрушаться. При полном отсутствии строгого дальнего порядка вокруг дефектов образуются «островки» решетки. При этом «островки» начинают проворачиваться вокруг закрепленных центров пиннинга, образуя фазу «вращающаяся решетка». И на третьей стадии происходит полное расплавление решетки (фаза вихревой жидкости) [6]. Ожидается, что точка перехода из «вращающейся решетки» в вихревую жидкость сильно зависит от величины потенциала дефектов. Данная работа посвящена в основном выявлению этой зависимости, т.е. определению фазовой границы перехода «вращающаяся решетка» — вихревая жидкость как функции потенциала дефектов.

2. Описание модели

Для исследования поведения решетки абрикосовских вихрей в ВТСП в большинстве случаев используется метод Монте-Карло (МК).

Методом Монте-Карло можно получить конфигурационные характеристики системы, в отличие от метода молекулярной динамики, дающего также и динамические характеристики. Путем выбора ансамбля, например, такого, как канонический, метод Монте-Карло позволяет вычислять наблюдаемые физические величины при фиксированном числе частиц, объеме и температуре.

Главное преимущество метода Монте-Карло состоит в том, что не требуется никаких приближений, взаимодействия учитываются точно. При этом система описывается наиболее удобным для задачи модельным гамильтонианом [1]. В настоящей работе использован стандартный метод Монте-Карло в сочетании с алгоритмом Метрополиса для канонического ансамбля [8,9].

Рассматривается двумерная система абрикосовских вихрей, которые представляем классическими частицами с дальнедействующим взаимодействием, расположенными на периодической прямоугольной сетке. Дискретность пространственной сетки выбирается такой, чтобы ее период был много меньше периода треугольной решетки. В данной модели учитывается вклад в энергию от взаимодействия вихрей друг с другом и с дефектами. При расчетах всегда выбирается наикратчайшее расстояние между вихрями с учетом периодичности. В рамках всего сказанного модельный гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N H(r_i, r_j) n_i n_j + \sum_{i=1}^N U_p(r_i) n_i, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H(r_i, r_j) &= \frac{\Phi_0^2 d}{2\pi\lambda^2(T)\mu_0} K_0 \left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda(T)} \right) = \\ &= U_0(T) K_0 \left(\frac{|r_i - r_j|}{\lambda(T)} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $U_p(r_i)$ — энергия взаимодействия вихря с дефектом на узле i ; n_i — числа заполнения вихрей (0 или 1) на i -ом узле пространственной сетки; $\Phi_0 = hc/2e$ — квант магнитного потока; K_0 — функция Бесселя нулевого порядка мнимого

аргумента; d — толщина сверхпроводящего слоя; $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн·м, $\lambda(T) = \lambda(0)/[1 - (T/T_c)^3]^{1/2}$ — глубина проникновения магнитного поля.

3. Методика расчета

Для конкретного расчета были выбраны параметры, близкие к характеристикам слоистого ВТСП $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$: $d = 2,7 \text{ \AA}$; $\lambda(T=0) = 1800 \text{ \AA}$; $T_c = 84 \text{ K}$. Объемные вихри в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ распадаются на плоскостные двумерные «вихревые блины», связанные между плоскостями слабой связью. Поэтому в данном случае можно говорить о квазидвумерности вихревой структуры и рассматривать двумерную модель. Величина внешнего поля выбирается $B = 0,1 \text{ Тл}$, что соответствует реальному масштабу индукции поля, при котором в висмутовых ВТСП наблюдают плавление вихревой решетки.

Расчеты проводились на плоской пространственной сетке размером 200×200 с периодическими граничными условиями. Основные данные получены для числа вихрей $N_v = 150$ и числа дефектов $N_d = 5$ (двумерная концентрация дефектов $\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$). Дефекты размещались на сетке случайным образом. Реальная концентрация вихрей, соответствующая данному полю B , воспроизводилась изменением цены деления пространственной ячейки так, чтобы период треугольной решетки вихрей a_v удовлетворял соотношению $a_v = (2\Phi_0/B\sqrt{3})^{1/2}$. То есть при изменении внешнего магнитного поля изменялась именно концентрация вихрей, что и отображено в модели: при изменении магнитного поля изменяется площадь рассматриваемой области при постоянном параметре моделирования — числе вихрей. Таким образом, при изменении поля меняется концентрация вихрей.

Дефекты моделировались в виде точечных ям с одинаковым потенциалом, и энергия взаимодействия вихря с центром пиннинга выглядела следующим образом [10,11]:

$$U_p(r, T) = - [U_0(T)/8] \delta_{r,ri}. \quad (3)$$

Реальная картина такова, что при исследуемых магнитных полях концентрация вихревых линий много больше, чем концентрация дефектов. Кроме того, в расчетах мы используем концентрации дефектов, которые близки к экспериментальным значениям [12].

По результатам численных расчетов воспроизводилась теплоемкость (как функция

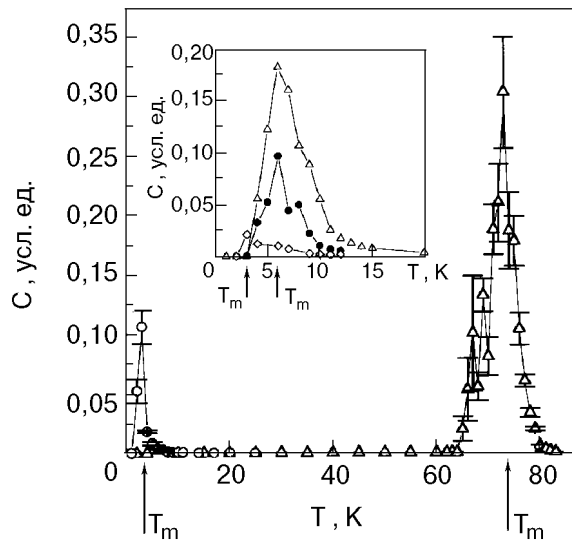


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости в поле дефекта для U_p , мэВ: 1 (○) и 100 (△). На вставке: влияние на температуру плавления концентрации вихрей $N_v = 50$ (◇); 100 (●); 150 (△) при $U_p = 70$ мэВ.

температуры), выражение для которой через флуктуацию внутренней энергии имеет вид ($k_B = 1$)

$$C(T) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 / T^2. \quad (4)$$

На рис. 1 показаны примеры расчета $C(T)$ и определения температуры плавления T_m для двух значений потенциала дефектов: $U_p = 1$ и 100 мэВ. Расчеты проводились для потенциалов в диапазоне от 1 до 100 мэВ при числе вихрей $N_v = 150$.

Для того чтобы убедиться, что число вихрей макроскопически большое для данной задачи, проводился расчет теплоемкости при одном и том же потенциале дефектов, но при разном числе вихрей (например, $N_v = 50, 100, 150$). Результаты представлены на вставке к рис. 1. Видно, что уже при $N_v = 100$ и 150 температуры T_m совпадают в пределах погрешности, и при увеличении числа вихрей от 50 до 100 пик теплоемкости смещается в сторону больших температур, а также увеличивается его высота. При числе вихрей $N_v = 150$ уже не происходит смещение температуры пика. Из этого можно сделать вывод, что число вихревых точек $N_v = 150$ макроскопически велико для нашей задачи. Также проводились тестовые расчеты теплоемкости для разного числа МК шагов.

Стандартная процедура Монте-Карло заключается в следующем (см. также [8,9]). Первоначально вихри произвольным образом

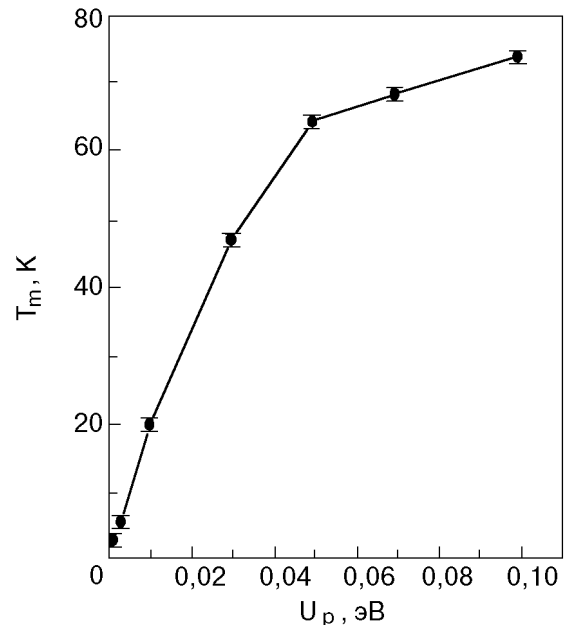


Рис. 2. Зависимость температуры плавления от величины потенциала дефекта.

распределены на сетке фазового пространства, имитирующего плоскость ВТСП. Очевидно, что первоначальное произвольное расположение вихрей не отвечает минимуму энергии, поэтому систему заставляют эволюционировать для перебора наиболее энергетически выгодных конфигураций согласно так называемому алгоритму Метрополиса, реализующему гиббсовское распределение. Типичное полное число МК шагов для расчета бралось 60 000. Число шагов для термализации системы (когда система попадает на устойчивые конфигурации с минимальной энергией) — 30 000, так что за это число МК шагов рассматриваемая система успевала прийти к равновесию. Минимальное изменение мгновенной конфигурации системы заключается в элементарном перемещении одного вихря. Под шагом Монте-Карло мы понимаем однократное перемещение всех вихрей в системе, т.е. за шаг Монте-Карло каждый вихрь был сдвинут в среднем один раз. Оценки показали, что этого числа МК шагов достаточно для расчета теплоемкости с минимальными статистическими погрешностями.

4. Результаты расчетов и обсуждение

В процессе расчета наблюдались все три отмеченные ранее стадии плавления вихревой решетки [7]. Была рассчитана теплоемкость системы для различных значений потенциала дефектов как функция температуры. По

особенности на температурной зависимости $C(T)$ можно точно определить температуру перехода, при котором вихревая решетка, разделенная на островки, закрепленные на дефектах, переходит в фазу вихревой жидкости. Это и есть температура T_m (по терминологии работы [7], T_{m2}).

Определив T_m , мы получили зависимость температуры перехода от потенциала дефектов (рис. 2). Видно, что при увеличении потенциала дефекта происходит монотонный рост температуры плавления. Полученные результаты могут быть интерпретированы в простой физической картине процессов, которые происходят с вихревой решеткой в ВТСП в присутствии дефектов. Пусть имеется вихревая решетка при некотором потенциале дефекта. В ней происходит конкуренция трех взаимодействий: взаимодействия вихрей друг с другом, которое определяет жесткость решетки, тепловых флуктуаций и взаимодействия вихрей с дефектом. При низкой температуре решетка сохраняет свою жесткость. Вихрь, закрепившийся в потенциальной яме дефекта, с большой вероятностью локализуется на ней. При увеличении температуры решетка начинает терять свою жесткость сначала вдали от дефекта. Вихрь, закрепленный на дефекте, удерживает вблизи себя островок когерентной области решетки вихрей (фаза «вращающаяся решетка» [7]). Вдали от него решетка начинает разрушаться. При дальнейшем увеличении температуры возрастают тепловые флуктуации и размер «удерживаемой» области уменьшается. По этой причине возрастает вероятность того, что вихрь (вместе с удерживаемой когерентной областью) покинет потенциальную яму. При еще больших температурах островки разрушаются, вихри отрываются от дефектов и происходит полное расплавление вихревой системы. В области больших значений потенциалов дефектов, дефект будет удерживать около себя вихри при более высокой температуре, что и объясняет повышение T_m при увеличении глубины потенциальной ямы дефектов в сложной картине фазы «вращающаяся решетка» [7]. Почему наблюдается более медленный рост T_m вблизи критической области (рис. 2)? Мы полагаем, что это объясняется температурной зависимостью глубины потенциальной ямы дефекта, заложенной в выражение (3). Более того, расчеты показывают, что перенормировка глубины потенциальной ямы с учетом температуры «выпрямляет» зависимость $T_m(U_p)$.

В заключение стоит отметить, что эксперименты неоднократно показывали существование некоторой промежуточной фазы, исследуемой в нашей модели, с отличной от треугольной решетки и вихревой жидкости динамикой. Например, в экспериментальной работе [13] на кристаллах $TmBa_2Cu_3O_{6,9}$ было получено скейлинговое поведение нормированной скорости релаксации экранирующих токов: $S/T = f_s (H/H_{max})$, где $S = d \log M_{irr} / d \log v$; $v = dH/dt$, M_{irr} — ширина гистерезиса; v — скорость развертки магнитного поля. На зависимости S/T от H/H_{max} четко выделялись три области с различной динамикой магнитного потока. Первая область, по мнению авторов [14], качественно согласовывалась с эластичной теорией коллективного крипа для случая малых вихревых связей; вторая связывалась авторами с возникновением пластических деформаций в вихревой решетке, а третья соответствовала возникновению вихревой жидкости.

Экспериментальное доказательство наличия промежуточной фазы на фазовой диаграмме висмутовых ВТСП приведено в недавней работе [14], где сказано, что твердая фаза под линией плавления, очевидно, подразделена на две фазы. В первой фазе (I) вихри неподвижны, во второй (II) начинают двигаться, и при последующем повышении температуры происходит переход в вихревую жидкость. Фазу I авторы определили как «слаборазупорядоченное брегговское стекло», а фазу II — «сильноразупорядоченное джозефсоновское стекло». Влияние точечного пиннинга на систему вихрей и образование обратной линии на фазовой диаграмме качественно было показано в [15]. Автор этой работы показал, что в двумерном случае точечный пиннинг оказывает влияние на вихревую жидкость в определенной области под линией плавления. В нашем случае эта область отвечает фазе «вращающаяся решетка» (ориентированное плавление) — фаза II.

В недавно появившихся работах по экспериментальному наблюдению теплоемкости вихревой системы также были четко видны пики на зависимостях теплоемкости монокристаллов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ от температуры, соответствующие переходу в вихревую жидкость [16,17]. Вопрос о роде перехода остается открытым. Однако, зная, что в эксперименте наряду с пиком теплоемкости наблюдается скачок намагниченности системы, можно только предположить, что это

термодинамический переход первого рода [16,17].

5. Заключение

При изучении плавления вихревой системы в ВТСП в присутствии дефектов обнаружено, что потенциал дефектов сильно влияет на температуру перехода между фазами «вращающаяся решетка» и вихревая жидкость. При увеличении глубины потенциальной ямы дефекта растет температура этого перехода и расширяется температурный диапазон, где реализуется промежуточная «вращающаяся фаза». В эксперименте увеличение температурного диапазона, в котором существует эта промежуточная фаза, может приводить к существенному уширению ВАХ [18,19].

Работа выполнена при финансовой поддержке ГНТП АНФКС, подпрограмма «Сверхпроводимость», проекты № 99011 и № 96026.

1. М. Е. Грачева, М. В. Катаргин, В. А. Кашурников, И. А. Руднев, *ФНТ* **23**, 1151 (1997).
2. А. А. Абрикосов, *ЖЭТФ* **8**, 1174 (1957).
3. J. W. Schneider, S. Schafroth, and P. F. Meier, *Phys. Rev.* **B52**, R13149 (1995).
4. S. Ruy, S. Doniach, G. Deutscher, and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 710 (1992).
5. K. Yates, D. J. Newman, and P. A. J. de Groot, *Physica* **C241**, 111 (1995).
6. K. Yates, D. J. Newman, and P. A. J. de Groot, *Phys. Rev.* **B52**, R13, 149 (1995).
7. М. Е. Грачева, В. А. Кашурников, И. А. Руднев, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 269 (1997).

8. Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*, Наука, Москва (1990).
9. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
10. Kyungsun Moon, Richard T. Scalettar, and Gergely T. Ximányi, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2778 (1996).
11. Seungoh Ryu, M. HELLERQVIST, S. Doniach, A. Kapitulnik, and D. Stroud, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5114 (1996).
12. G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
13. G. K. Perkins, L. F. Cohen, A. A. Zhukov, and A. D. Caplin, *Phys. Rev.* **B55**, 8110 (1997).
14. D. T. Fuchs, E. Zeldov, T. Tamegai, S. Ooi, M. Rappaport, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4971 (1998).
15. D. R. Nelson, *Physica* **C263**, 12 (1996).
16. A. Schilling, R. A. Fisher, N. E. Phillips, U. Welp, W. K. Kwok, and G. W. Grabtree, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4833 (1997).
17. M. Roulin, A. Junod, A. Erb, and E. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1722 (1998).
18. A. N. Lykov, C. Attanasio, L. Maritato, and S. L. Prischera, *Supercond. Sci. Technol.* **10**, 119 (1997).
19. В. Ф. Елесин, И. А. Есин, И. А. Руднев, Б. Л. Кривц, Е. П. Лимитовский, *СФХТ* **6**, 807 (1993).

Vortex lattice melting in layered HTSC in the field of defects

M. E. Gracheva, V. A. Kashurnikov,
O. A. Nikitenko, and I. A. Rudnev

The effect of defect potential on melting temperature of the vortex lattice in the layer HTSC is investigated. It is found that an increase in the defect potential shifts the phase transition point to the critical temperature, extending the range of intermediate phase «rotating lattice».