

# О влиянии дислокационных скоплений на критическую температуру высокотемпературных сверхпроводников

А. В. Гуревич

Applied Superconductivity Center, University of Wisconsin, Madison, Wisconsin, 53706, U.S.A.

Э. А. Пашицкий

Інститут фізики НАН України, Україна, 252650, г. Київ, пр. Науки, 46  
E-mail: pashitsk@iop.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 22 июня 1998 г.

Показано, что скопления краевых дислокаций с параллельными векторами Бюргерса в плоскости скольжения могут приводить к существенным локальным изменениям критической температуры  $T_c$  в деформированных кристаллах высокотемпературных сверхпроводников вследствие перераспределения свободных носителей тока в полях упругой деформации ионной кристаллической решетки и сильной немонотонной зависимости  $T_c$  от концентрации носителей, если линейные размеры дислокационных скоплений значительно превышают длину когерентности и радиус экранирования.

Показано, що скупчення крайових дислокацій з паралельними векторами Бюргерса у площині проковзування можуть призводити до суттєвих локальних змін критичної температури  $T_c$  у деформованих кристалах високотемпературних надпровідників внаслідок перерозподілу вільних носіїв струму в полях пружної деформації іонної кристалічної гратки та сильної немонотонної залежності  $T_c$  від концентрації носіїв, якщо лінійні розміри дислокаційних скупчень значно перевищують довжину когерентності та радіус екранування зарядів.

PACS: 74.72.-h

## Введение

Известно, что в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) на основе купрятных металлооксидных соединений (МОС) критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$  отлична от нуля в очень узком диапазоне изменения концентрации  $n$  свободных носителей тока (дырок, электронов проводимости) и немонотонно изменяется в зависимости от  $n$  (приблизительно по параболическому закону) [1,2]:

$$T_c(n) = T_{cm} - A(n - n_m)^2, \quad (1)$$

где  $n_m$  — значение, при котором достигается максимальное значение  $T_{cm}$ . В настоящей работе показано, что если поля упругих напряжений вблизи структурных дефектов ионной кристаллической решетки слоистых купрятных

МОС изменяются на макроскопических масштабах, значительно превышающих длину когерентности  $\xi_0$  и радиус экранирования  $r_S$ , то благодаря условию электронейтральности происходят как пространственное перераспределение концентрации носителей тока  $n(r)$ , так и, в соответствии с (1), существенные локальные изменения  $T_c(r)$ .

## Зависимость $T_c$ от тензора деформации $\epsilon_{ik}$

Предполагая в рамках теории упругости линейную зависимость между  $n(r)$  и  $\epsilon_{ik}(r)$ , можем представить  $T_c$  в анизотропном деформированном кристалле в виде следующей квадратичной зависимости от тензора напряжений  $\epsilon_{ik}$  [3]:

$$T_c = T_{c0} - C_{ik} \epsilon_{ik} - Q_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}. \quad (2)$$

Здесь  $T_{c0}$  — значение  $T_c$  в недеформированном кристалле;  $Q_{ijkl}$  — тензор четвертого ранга, симметричный относительно перестановок индексов  $i \leftrightarrow j$  и  $k \leftrightarrow l$  ( $i, j, k, l = x, y, z$ ), а диагональные компоненты тензора второго ранга  $C_{ik}$  вдоль главных кристаллографических осей  $C_{xx} = C_a$ ,  $C_{yy} = C_b$  и  $C_{zz} = C_c$  определяют изменения  $T_c$  при слабой одноосной деформации кристалла. Величины  $C_a$ ,  $C_b$  и  $C_c$  связаны с производными  $T_c$  по давлению в направлении соответствующих осей кристалла. Так, например, в оптимально допированных монокристаллах  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  эксперименты по одноосному сжатию (растяжению) приводят к следующим результатам [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_c}{\partial P_a} &\approx -1,9 \text{ [К/ГПа]}; & \frac{\partial T_c}{\partial P_b} &\approx 2,2 \text{ [К/ГПа]}; \\ \frac{\partial T_c}{\partial P_c} &\approx 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$P_a$ ,  $P_b$  и  $P_c$  означают одноосное давление вдоль осей **a**, **b** и **c**. Согласно [5], это соответствует значениям  $C_a \approx -220$  К,  $C_b \approx 315$  К и  $C_c \approx 0$ .

Противоположные знаки  $C_a$  и  $C_b$  в монодоменных кристаллах YBCO связаны с сильной анизотропией их упругих и электронных свойств в плоскости *ab* благодаря наличию упорядоченных 1D цепочек CuO вдоль оси **b**, которые играют роль «резервуара» в процессах допирования дырками купратных 2D слоев CuO<sub>2</sub>.

В кристаллах  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ , которые являются почти изотропными в плоскости *ab*, одноосные деформации приводят к значениям [6]

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_c}{\partial P_a} &\approx 1,6 \text{ [К/ГПа]}; & \frac{\partial T_c}{\partial P_b} &\approx 2,0 \text{ [К/ГПа]}; \\ \frac{\partial T_c}{\partial P_c} &\approx -2,8 \text{ [К/ГПа]}, \end{aligned} \quad (4)$$

что соответствует близким значениям  $C_a$  и  $C_b$ . Однако в обоих случаях (YBCO и BSCCO) вследствие разных знаков производных  $\partial T_c / \partial P_i$  вдоль разных осей зависимость  $T_c$  от гидростатического (изотропного) давления  $P$  является слабой ( $\sum_i \partial T_c / \partial P_i \approx 0$ ). В

противоположность этому в керамиках  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  влияние гидростатического давления на  $T_c$  весьма велико

( $\partial T_c / \partial P_i \approx 1$  [К/ГПа]), что позволяет повысить  $T_c$  до 160 К и выше при  $P \geq 10$  ГПа [7,8].

Возвращаясь к квадратичной зависимости  $T_c$  от  $\epsilon_{ik}$  (2), отметим, что в кристаллах с орторомбической симметрией тензор  $Q_{ijkl}$  имеет девять независимых компонент [9]. Если ограничиться рассмотрением планарных деформаций в плоскости слоев, то остаются только четыре независимые компоненты тензора  $Q_{ijkl}$ , так что соотношение (2) принимает вид

$$\begin{aligned} T_c &= T_{c0} - C_a \epsilon_{xx} - C_b \epsilon_{yy} - \\ &- Q_a \epsilon_{xx}^2 - Q_b \epsilon_{yy}^2 - Q_1 \epsilon_{xx} \epsilon_{yy} - Q_2 \epsilon_{xy}^2. \end{aligned} \quad (5)$$

В изотропном (в плоскости *ab*) кристалле, когда  $C_a = C_b = C$ ;  $Q_a = Q_b = \frac{1}{2}Q_1$  и  $Q_2 = 0$ , зависимость  $T_c$  от дилатации  $\epsilon = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}$  приводится к виду

$$T_c = T_{c0} - C\epsilon - (C\epsilon)^2 / 4\Delta T_m, \quad (6)$$

где  $\Delta T_m = T_{cm} - T_{c0}$ , а коэффициенты подобраны таким образом, чтобы максимальное значение  $T_{cm}$  достигалось при  $\epsilon_m = -2\Delta T_m/C$ .

### Упругие деформации и $T_c$ вокруг протяженных дислокационных скоплений

Как известно, компоненты тензора деформации  $\epsilon_{ik}(r)$  вокруг линейной краевой дислокации, параллельной оси  $\mathbf{c} \parallel \mathbf{z}$ , имеют вид [10]

$$\epsilon_{xx}(x, y) = -\frac{By [(3 - 2\sigma)x^2 + (1 - 2\sigma)y^2]}{4\pi(1 - \sigma)(x^2 + y^2)^2}, \quad (7)$$

$$\epsilon_{yy}(x, y) = -\frac{By [(1 - 2\sigma)y^2 - (1 + 2\sigma)x^2]}{4\pi(1 - \sigma)(x^2 + y^2)^2}, \quad (8)$$

$$\epsilon_{xy}(x, y) = -\epsilon_{yx}(x, y) = \frac{Bx(x^2 - y^2)}{4\pi(1 - \sigma)(x^2 + y^2)^2}, \quad (9)$$

где  $B$  — длина вектора Бюргерса  $\mathbf{B}$ , а  $\sigma$  — коэффициент Пуассона. Для бесконечной периодической цепочки дислокаций (дислокационной стенки) вдоль оси  $\mathbf{b} \parallel \mathbf{y}$  с одинаковым расстоянием  $d$  между соседними дислокациями и векторами Бюргерса  $\mathbf{B} \perp \mathbf{y}$ , заменяя в (6)–(8) координату  $y$  на  $(y - nd)$  и выполняя суммирование по  $n$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ , получаем (ср. с тензором напряжений [10])

$$\epsilon_{+}^{\perp}(x, y) \equiv \epsilon_{xx}^{\perp}(x, y) + \epsilon_{yy}^{\perp}(x, y) = -\frac{\epsilon_a \sin(q)}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)}; \quad (10)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{\perp}(x, y) \equiv \varepsilon_{xx}^{\perp}(x, y) - \varepsilon_{yy}^{\perp}(x, y) = -\frac{2 \varepsilon_b p \operatorname{sh}(p) \sin(q)}{[\operatorname{ch}(p) - \cos(q)]^2}, \quad (11)$$

$$\varepsilon_{xy}^{\perp}(x, y) \equiv -\varepsilon_{yx}^{\perp}(x, y) = \frac{\varepsilon_b p [\operatorname{ch}(p) \cos(q) - 1]}{[\operatorname{ch}(p) - \cos(q)]^2}; \quad (12)$$

$$\varepsilon_a = \frac{B(1 - 2\sigma)}{2d(1 - \sigma)}; \quad \varepsilon_b = \frac{B}{4d(1 - \sigma)}; \quad (13)$$

$$p = \frac{2\pi x}{d}; \quad q = \frac{2\pi y}{d}.$$

Как видим, при  $x >> d/2\pi$  все компоненты  $\varepsilon_{ik}$  экспоненциально малы ( $\sim \exp(-2\pi x/d)$ ) из-за взаимной компенсации («аннигиляции») периодических знакопеременных напряжений соседних дислокаций.

Совершенно иная ситуация возникает в случае дислокационной стенки с векторами Бюргерса, лежащими в плоскости скольжения  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{y}$ , для которой соответствующие компоненты тензора деформаций равны (ср. с [10])

$$\varepsilon_{+}^{\parallel}(x, y) \equiv \varepsilon_{xx}^{\parallel}(x, y) + \varepsilon_{yy}^{\parallel}(x, y) = -\frac{\varepsilon_a \operatorname{sh}(p)}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)}; \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{-}^{\parallel}(x, y) \equiv \varepsilon_{xx}^{\parallel}(x, y) - \varepsilon_{yy}^{\parallel}(x, y) = \\ = -\frac{2 \varepsilon_b}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)} \left\{ \operatorname{sh}(p) - \frac{p [\operatorname{ch}(p) \cos(q) - 1]}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)} \right\}; \end{aligned} \quad (15)$$

$$\varepsilon_{xy}^{\parallel}(x, y) = \frac{\varepsilon_b \sin(q)}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)} \left[ 1 - \frac{p \operatorname{sh}(p)}{\operatorname{ch}(p) - \cos(q)} \right]. \quad (16)$$

Как видим, в данном случае компоненты  $\varepsilon_{\pm}^{\parallel}$  являются конечными и постоянными при  $|x| \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \varepsilon_{+}^{\parallel} = -\frac{B(1 - 2\sigma)}{2d(1 - \sigma)} \operatorname{sgn} x, \quad (17)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \varepsilon_{-}^{\parallel} = -\frac{B \operatorname{sgn} x}{2d(1 - \sigma)},$$

благодаря суммированию деформаций одного знака от отдельных дислокаций, но имеют противоположные знаки по разные стороны дислокационной стенки (при  $x > 0$  и  $x < 0$ ). В то же время недиагональная компонента  $\varepsilon_{xy}^{\parallel} \rightarrow 0$  при  $|x| \rightarrow \infty$ . Однако такая бесконечная дислокационная стенка обладает бесконечной

упругой энергией на единицу длины (вдоль дислокаций) и является неустойчивой (энергетически невыгодной). Поэтому в реальных кристаллах могут существовать метастабильные дислокационные стенки (скопления) конечной длины, закрепленные с обоих концов каким-либо препятствием (границами зерен, поверхностями раздела фаз и т. п.).

При этом в результате расталкивания дислокаций происходит увеличение их плотности вблизи препятствий (стопоров).

Как показано в [9,11,12], в континуальном приближении распределение плотности дислокаций  $S(y)$  в линейном дислокационном скоплении длиной  $2L$ , к которому приложено внешнее давление  $P$  (вдоль оси  $x$ ), определяется выражением

$$S(y) = \frac{N + Gy}{\pi \sqrt{L^2 - y^2}}, \quad (18)$$

где  $N = N_+ - N_-$  — разность чисел дислокаций с положительным ( $\mathbf{B} > 0$ ) и отрицательным ( $\mathbf{B} < 0$ ) направлениями вектора Бюргерса ( $\mathbf{B} \parallel \mathbf{y}$ ), а  $G = 2\mu P(1 - \sigma)/\mu B$ , где  $\mu$  — модуль сдвига.

Компоненты тензора неоднородной деформации в окрестности такого дислокационного скопления могут быть вычислены по формуле

$$\tilde{\varepsilon}_{ij}(x, y) = \int_{-L}^{L} dy' S(y') \varepsilon_{ij}(x, y - y'), \quad (19)$$

где  $\varepsilon_{ij}$  определяются выражениями (7)–(9), из которых следует, что интеграл (19) сводится к интегралам типа

$$I_k(x, y) = \int_{-L}^{L} dy' \frac{(1 + gy')[A(y - y')^2 + Bx^2]}{\sqrt{L^2 - y'^2} [x^2 + (y - y')^2]^k}, \quad (20)$$

где  $g = G/N$ , а  $k = 1, 2$ . Производя замену переменных  $y' = L \cos(t)$ , нетрудно убедиться, что интегралы  $I_1$  и  $I_2$  выражаются через реальную и мнимую части и их первые производные от комплексной функции

$$F(z) = \int_0^{\pi} \frac{dt}{z + \cos(t)} = \frac{\pi \operatorname{sgn} z}{\sqrt{z^2 - 1}}, \quad (21)$$

где  $z = \eta + i\zeta$ ,  $\eta = x/L$  и  $\zeta = y/L$ . В результате после несложных вычислений получаем

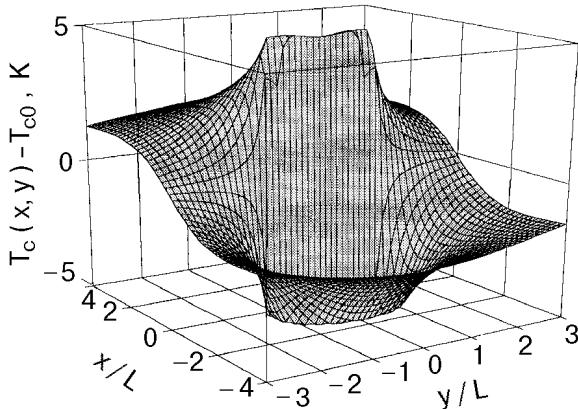


Рис. 1. Пространственное распределение изменения критической температуры  $\Delta T_c = T_c(x, y) - T_{c0}$  в плоскости слоев CuO в случае линейного скопления краевых дислокаций вдоль оси  $x$  с векторами Бюргерса в плоскости скольжения  $x = 0$ , локализованными между двумя стопорами на расстоянии  $2L$ . Расчет по формуле (29) при  $\Delta T_m = 5$  К;  $T_0 = 6$  К,  $g = 0$ .

$$\tilde{\varepsilon}_{xx} + \tilde{\varepsilon}_{yy} = -\varepsilon_1(1 - 2\sigma) \operatorname{Im} \left\{ F(z)(1 - gz) \right\}; \quad (22)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{xx} - \tilde{\varepsilon}_{yy} = -\varepsilon_1 \operatorname{Im} \left\{ \left( 2 - z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[ F(z)(1 - gz) \right] \right\}; \quad (23)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{xy} = \frac{\varepsilon_1}{4} \operatorname{Re} \left\{ \left( 2 - z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[ F(z)(1 - gz) \right] \right\}, \quad (24)$$

где  $\varepsilon_1 = NB/2\pi L(1 - \sigma)$ . В простейшем случае изотропного (в *ab* плоскости) кристалла, когда  $\tilde{\varepsilon}_{xx} = \tilde{\varepsilon}_{yy}$  и  $\tilde{\varepsilon}_{xy} = 0$ , для неоднородной упругой дилатации получаем выражение

$$\tilde{\varepsilon}(x, y) = \frac{NB(1 - 2\sigma)}{2\sqrt{2}\pi L(1 - \sigma)} [I(\eta, \zeta) - gJ(\eta, \zeta)], \quad (25)$$

где

$$I(\eta, \zeta) = \frac{\eta}{|\eta| R(\eta, \zeta)} \sqrt{R(\eta, \zeta) + 1 + \eta^2 - \zeta^2}; \quad (26)$$

$$J(\eta, \zeta) = \frac{\zeta}{|\zeta| R(\eta, \zeta)} \sqrt{R(\eta, \zeta) + \zeta^2 - \eta^2 - 1} - \zeta I(\eta, \zeta); \quad (27)$$

$$R(\eta, \zeta) = \sqrt{(1 + \eta^2 - \zeta^2)^2 + 4\eta^2\zeta^2}. \quad (28)$$

Предполагая, что  $L >> r_S$ , так что концентрация носителей «подстраивается» под деформацию ионной решетки, и подставляя (25) в выражение (6) вместо  $\varepsilon$ , находим неоднородное распределение критической температуры в окрестности дислокационного скопления:

$$T_c(\eta, \zeta) = T_{c0} + T_0 [I(\eta, \zeta) - gJ(\eta, \zeta)] -$$

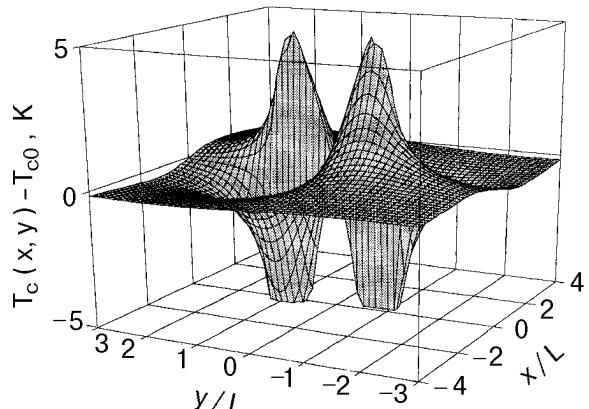


Рис. 2. Пространственное распределение изменения критической температуры в плоскости слоев CuO для симметричного скопления с равным числом дислокаций с противоположными направлениями векторов Бюргерса при  $\Delta T_m = 5$  К;  $T_0 = 1$  К и  $gT_0 = 6$  К.

$$- T_0^2 [I(\eta, \zeta) - gJ(\eta, \zeta)]^2 / 4\Delta T_m, \quad (29)$$

где

$$T_0 = \frac{CNB(1 - 2\sigma)}{2\sqrt{2}\pi L(1 - \sigma)}. \quad (30)$$

Если  $L >> \xi_0$ , то такой же профиль имеет распределение сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta(r)$ .

На рис. 1 показано пространственное распределение разности  $(T_c - T_{c0})$  в окрестности дислокационного скопления при  $P = 0$  с  $N \neq 0$ , а на рис. 2 — в окрестности дислокационного скопления с  $N = 0$  ( $N_+ = N_-$ ) при  $P \neq 0$ . Последний случай соответствует рождению пар дислокаций с антипараллельными векторами Бюргерса **B** под действием локального давления (источник дислокаций Франка–Рида). Как видим, локальные изменения  $T_c$  имеют противоположные знаки и разные абсолютные величины по разные стороны дислокационного скопления. Более сильным является эффект подавления  $T_c$  (см. рис. 1). Такие области с пониженным значением  $T_c(r)$  и  $\Delta(r)$  могут быть хорошими ловушками (центрами пиннинга) для вихрей Абрикосова, если  $L > \lambda_L$  (где  $\lambda_L$  — лондоновская глубина проникновения магнитного поля). Области с повышенными значениями  $T_c(r)$  и  $\Delta(r)$  могут быть более благоприятными для протекания транспортного сверхпроводящего тока, поскольку для них характерно более высокое значение критического тока распаривания. Эти области могут экспериментально наблюдаться с помощью

---

магнитооптических методов по захваченному магнитному потоку и проявляться в диамагнитном отклике ВТСП выше  $T_{c0}$ .

Настоящая работа посвящена 70-летию чл.-корр. НАН Украины Арнольда Марковича Косевича, чьи классические работы по теории дислокаций широко известны.

1. J. B. Torrance, A. Bezing, A. I. Nazzal, T. C. Huang, S. S. Parkin, D. T. Keane, S. J. LaPlaca, P. M. Horn, and G. A. Held, *Phys. Rev.* **B40**, 8872 (1989).
2. S. D. Obertelli, I. R. Cooper, and J. L. Tallon, *Phys. Rev.* **B46**, 14928 (1992).
3. A. Curevich and E. A. Pashitskii, *Phys. Rev.*, **B56**, 6213 (1997).
4. U. Welp, M. Grimsditch, S. Fleshler, W. Nessler, B. Veal, and G. W. Crabtree, *J. Supercond.* **7**, 159 (1994).
5. C. Meingast, O. Kraut, T. Wolf, H. Wühl, A. Erb, and G. Müller-Volf, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1634 (1991).
6. C. Meingast, A. Junod, and E. Walker, *Physica* **C272**, 106 (1996).
7. C. W. Chu, L. Gao, F. Chen, Z. I. Huand, R. L. Mend, and Y. Y. Xue, *Nature* **265**, 323 (1993).
8. M. Nunez-Redueire, I. L. Tholence, E. V. Antipov, J. J. Capponi, and M. Marezio, *Science* **262**, 97 (1993).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1976).

10. J. B. Hizth and J. Lathe, *Theory of Dislocations*, N-Y, Mc.Goon Hill (1968).
11. А. М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова думка, Київ (1978).
12. А. М. Косевич, *Теория реальных кристаллов*, Наукова думка, Київ (1981).

## On the influence of dislocation arrays on the critical temperature of high- $T_c$ superconductors

A. V. Gurevich and E. A. Pashitskii

It is shown that the arrays of edge dislocations with parallel Burgers vectors in the slip plane can lead to significant local changes in the critical temperature  $T_c$  of the deformed crystals of high-temperature superconductors. These changes are due to the redistribution of the current carriers in the elastic strain fields of the ion crystal lattice, as well as the strong nonmonotonic  $T_c$  dependence on the current carrier concentration, if the characteristic length of the dislocation arrays is much larger than the coherence length and screening radius.