

PACS: 62.50.+p, 72.20.-i

М.И. Даунов, И.К. Камилов, Т.Р. Арсланов, А.Б. Батдалов,
Д.М. Харкунова

О ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ТЕРМОЭДС В ОБЛАСТИ ПОЛИМОРФНОГО И СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДОВ

Институт физики Дагестанского научного центра РАН
ул. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия
E-mail: a.mollaev@mail.ru

Для описания теплофизических и термоэлектрических свойств твердого тела в области структурного и сверхпроводящего переходов применены модифицированный метод эффективной среды, теория протекания и известные математические выражения для гетерогенных систем. Выведены соответствующие формулы. Проанализированы экспериментальные данные.

1. Введение

С целью эффективного исследования гетерофазного состояния в динамике в области структурного и сверхпроводящего переходов в твердом теле в работах [1,2] были применены модифицированный метод эффективной среды, теория протекания и резистометрические данные. При этом учитывалось, что механизм возникновения бесконечного кластера во многих отношениях аналогичен фазовому переходу второго рода [3] и подходы, использованные в [1], адекватны также в случае сверхпроводящего перехода [2]. Уместно отметить, что по результатам одновременного измерения удельного сопротивления и намагниченности был определен относительный объем сверхпроводящей фазы $v_c = 0.2$ при температуре «зануления» электросопротивления $T = T_c$ [4,5]. Рассчитанная различными методами критическая доля разрешенного объема v_c в теории протекания варьирует от 0.15 до 0.19 [3]. Роль параметра порядка играет относительная доля высокопроводящей (сверхпроводящей) фазы, формирующей бесконечный кластер.

В настоящей работе подходы, использованные в [1,2], применены для описания теплофизических и термоэлектрических свойств твердого тела в области превращения.

2. Обсуждение экспериментальных результатов

Для описания термоэлектрических и теплофизических свойств в области полиморфного и сверхпроводящего переходов воспользуемся известными математическими выражениями для гетерогенных систем, обобщенными в [6]. Для двухкомпонентной системы имеем:

$$kz_2 + Bz + (k-3)\beta = 0, \quad (1)$$

$$\frac{b-\gamma}{1-b} = \frac{\nu}{(1-\nu)} \frac{(x-\alpha)}{(1-x)} \frac{(z-\beta)}{(1-z)\beta}, \quad (2)$$

$$\frac{b-\gamma}{1-b} = \frac{x-\alpha}{1-x} L(\lambda), \quad (3)$$

$$L(\lambda) = \frac{A_{II}(\lambda)\lambda_{II} + [3 - A_{II}(\lambda)]\lambda}{A_I(\lambda)\lambda_I + [3 - A_I(\lambda)]\lambda}. \quad (4)$$

Здесь $x = \sigma_I/\sigma$, $\alpha = \sigma_I/\sigma_{II}$, $z = \lambda_I/\lambda$, $\beta = \lambda_I/\lambda_{II}$, $\gamma = Q_{II}/Q_I$, $b = Q/Q_I$; σ , λ и Q – эффективные величины электро-, теплопроводности и термоэдс; σ_I , σ_{II} , λ_I , λ_{II} , Q_I , Q_{II} – электро-, теплопроводность и термоэдс соответственно диэлектрической (низкопроводящей – I) и металлической (высокопроводящей, сверхпроводящей – II) фаз; коэффициенты $k = (1-\beta) \left[(1-\nu)^{n+1} - 2(1-\nu)^2 + (1-\nu) \right] + 1$; $B = 3\nu - k + \beta [3(1-\nu) - k]$; $A_I = 1 + 2(1-\beta)(1-\nu)$; $A_{II} = \beta + (1-\beta)(1-\nu)^n$; ν – относительная объемная доля фазы II ($0 \leq \nu \leq 1$); $n = 14.3$ – подгоночный параметр, который был определен в [1] для порогового значения $\nu_c = 0.17$ [3].

Формула для эффективной электропроводности σ аналогична соотношению (1) с заменой z на x и β на α [1].

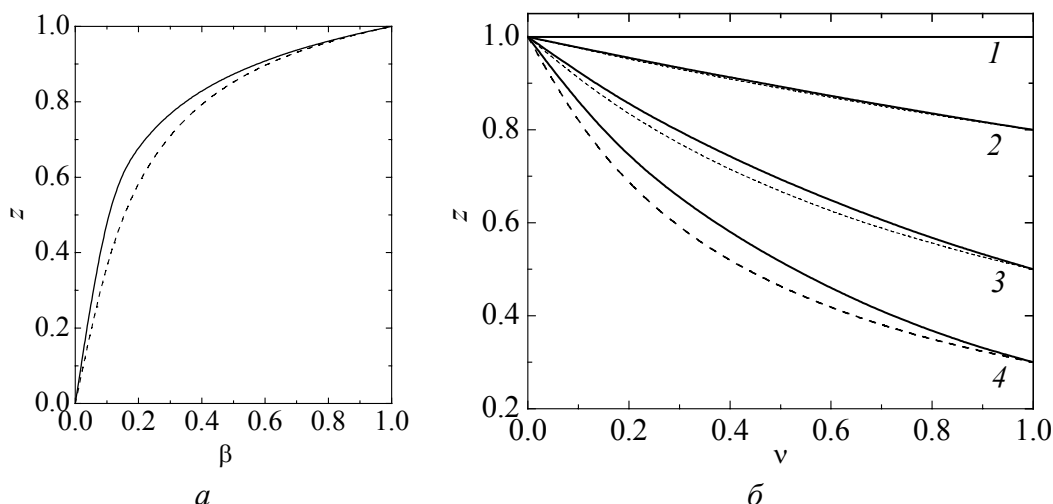


Рис. 1. Зависимости значений $z = \lambda_I/\lambda$, рассчитанные по формулам (1) (сплошная кривая) и (5) (штриховая): *a* – от величины β для относительного объема высокопроводящей (сверхпроводящей) фазы $\nu_c = 0.17$; *b* – от величины ν для различных значений β : 1 – 1, 2 – 0.8, 3 – 0.5, 4 – 0.3

Теплопроводность в отличие от электропроводности и термоэдс в различных фазах (в частности полупроводниковой λ_I и металлической λ_{II} , нормальной λ_I и сверхпроводящей λ_{II}) близки по величине. Как видно из рис. 1, при $1 \geq \beta \geq 0.3$ следует $L(\lambda) \approx 1$. Отсюда из (2), (3) при $L(\lambda) = 1$ получим:

$$\lambda = (1 - \nu)\lambda_I + \lambda_{II}\nu, \quad (5)$$

$$z = \frac{\beta}{(1 - \nu)\beta + \nu}, \quad (5a)$$

$$b = \frac{x(1 - \gamma) + (\gamma - \alpha)}{(1 - \alpha)}. \quad (6)$$

Из (6) следует: при $\alpha = \gamma = 0$ (сверхпроводящий переход)

$$b = x, \quad (6a)$$

а при $\alpha \ll \gamma \ll 1$ (полиморфный переход полупроводник–металл)

$$b = x + \gamma. \quad (6b)$$

В пороговой точке при $\nu_c = 0.17$ и $\alpha < 0.1$ согласно [1]

$$b = x_c + \gamma = 2.21\sqrt{\alpha} + \gamma. \quad (6b)$$

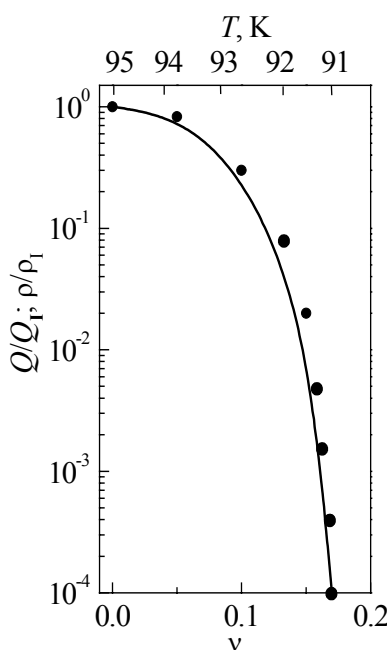


Рис. 2. Температурные зависимости нормализованных удельного сопротивления ρ (—) и термоэдс Q (---) от относительной объемной доли сверхпроводящей фазы ν в высокотемпературном керамическом сверхпроводнике $YBa_2Cu_3O_{6.8}$

На рис. 2–5 приведены экспериментальные данные для высокотемпературных керамических сверхпроводников $YBa_2Cu_3O_x$ ($x = 6.8, 6.9$) [2,7] и для полупроводника n -типа $InAs$ [8], а также результаты их количественного анализа с использованием формул (1)–(4).

По характеру температурных (рис. 2) и барических (рис. 3) зависимостей удельного сопротивления $\rho(T)$ и термоэдс $Q(T)$ при $T < 100$ К вплоть до критической температуры T_c в исследованных высокотемпературных сверхпроводниках можно наблюдать возникновение избыточной проводимости σ^1 и ее рост, а также убывание термоэдс, обусловленные появлением включений сверхпроводящей фазы II (см. введение и (6a)). Непосредственно из формулы для эффективной электропроводности следует

$$\sigma^1 = \sigma - \sigma_1 = \sigma_1 \frac{3\nu}{[(1 - \nu)^{n+1} - 2\nu]}. \quad (7)$$

Как видно из (7), избыточная проводимость возрастает с увеличением ν : при $\nu \ll 1$ $\sigma^1 \sim \nu$,

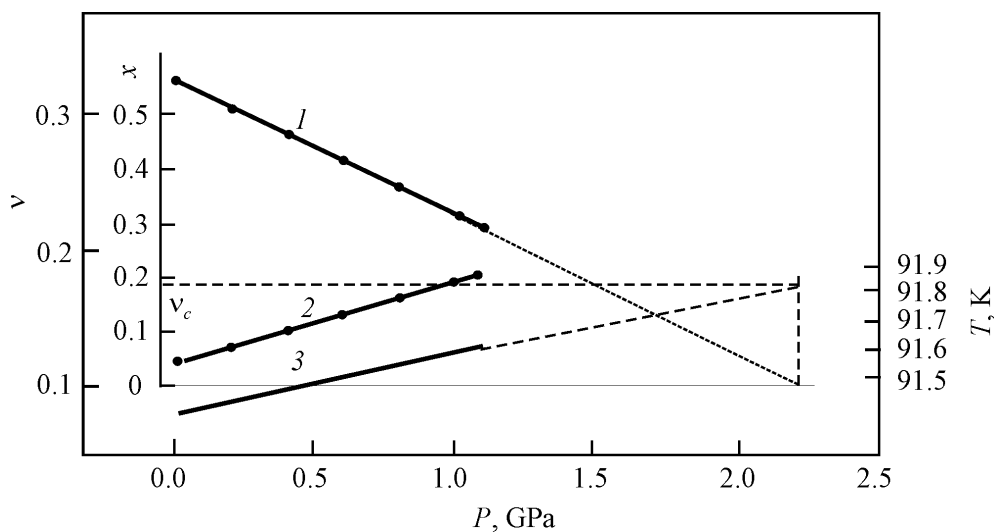


Рис. 3. Барические зависимости нормализованного электросопротивления при фиксированной температуре 91.6 К (кривая 1), температуре, соответствующей средней точке кривой перехода ($\rho = 1/2\rho_n$) (кривая 2), и рассчитанной объемной доли сверхпроводящей фазы ν для величины подгоночного параметра $n = 14.3$ (кривая 3) в высокотемпературном керамическом сверхпроводнике $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$

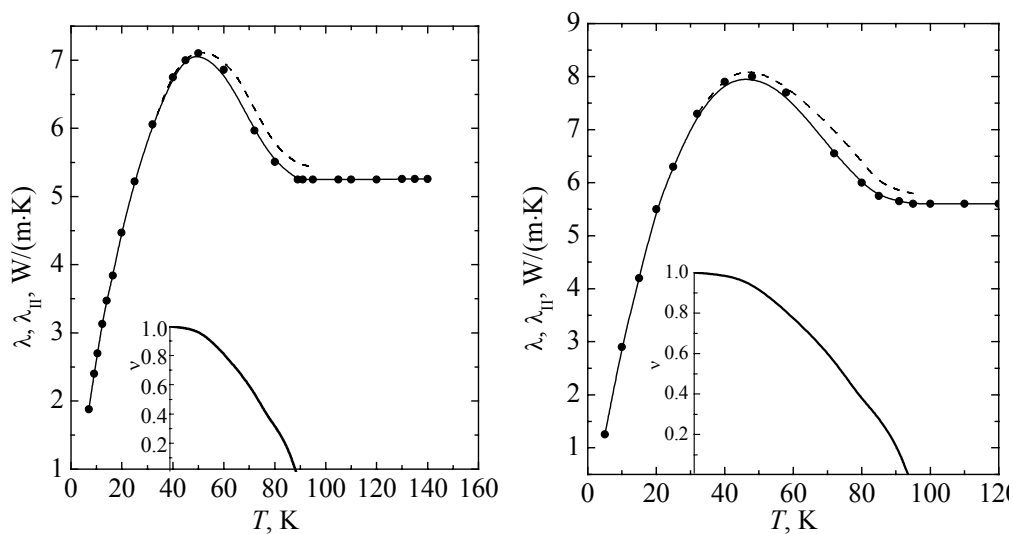


Рис. 4. Температурные зависимости эффективной теплопроводности λ (сплошная линия), теплопроводности сверхпроводящей фазы λ_{II} (штриховая линия) и относительной объемной доли высокопроводящей фазы ν в высокотемпературных керамических сверхпроводниках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$ (а) и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ (б): ---- – теория, —●— – эксперимент

при $\nu \rightarrow \nu_c \sigma^1 \rightarrow \infty$. Значение ν растет с убыванием температуры от нулевой величины при $T = T_1$ до $\nu_c = 0.17$ при $T = T_c$ (где $\rho = 0$, рис. 2, 3) и до $\nu = 1$ при $T = T_2$ (рис. 4). Одновременно в температурном интервале (T_1, T_2) наблюдаются возрастание эффективной теплопроводности λ , резко усиливающееся вблизи $T = T_c$ с максимумом при $T_m \approx T_c/2$, и ее последующее убывание (рис. 4). Очевидно, зависимость $\lambda(T)$ при $T < T_c$ определяется темпера-

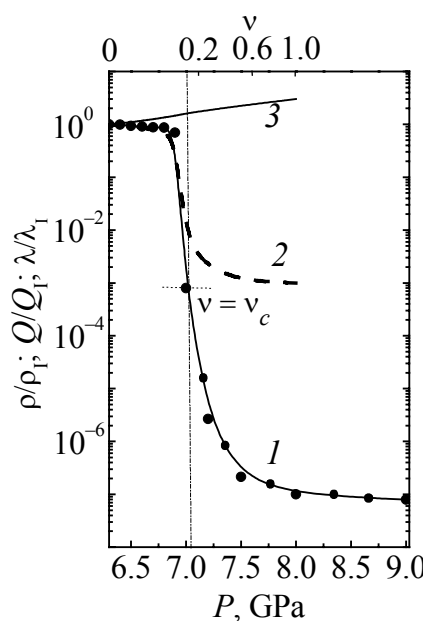


Рис. 5. Зависимости нормализованных удельного сопротивления (1), термоэдс (2) и теплопроводности (3) от всестороннего давления в *n*-InAs при 300 К

турной зависимостью теплопроводности сверхпроводящей фазы $\lambda_{II}(T)$, так как в не-сверхпроводящих образцах того же состава максимум отсутствует. На рис. 4 приведены зависимости $\lambda_{II}(T)$, рассчитанные по формулам (1)–(4), по величинам v и температурной зависимости нормальной фазы $\lambda_I(T)$, определенным соответственно интер- и экстраполяцией. Характер температурной зависимости $\lambda_{II}(T)$ обсуждался в [9,10]. Отметим, что в температурном интервале (T_1, T_c) $Q/Q_I \cong \rho/\rho_I$ (см. рис. 2), т.е. $L(\lambda) \approx 1$, и для оценки $\lambda(T)$ можно использовать соотношение (5).

Аналогичная ситуация реализуется в полупроводниках, например в *n*-InAs (рис. 5) в области полиморфного перехода полупроводник–металл под давлением с поправкой на конечную величину термоэдс металлической фазы $|Q_{II}| > 0$, как это видно из соотношений (6б) и (6в).

3. Выводы

Предлагаемая методика описания резистометрических, теплофизических и термоэлектрических свойств может быть применена не только при фазовых превращениях в твердом теле в динамике, но и для контроля и прогнозирования в технологических процессах, при создании разнообразных структур, а также может быть обобщена на любое число компонентов. Подчеркнем, что модель гетерофазная структура–эффективная среда является синтезом модифицированного метода эффективной среды и теории протекания и применима при $0 \leq \sigma_I/\sigma_{II} \leq 1$ и $0 < v < 1$, тогда как приближение эффективной среды дает ошибочные результаты в окрестности порога протекания, а теория протекания применима лишь вблизи порога протекания и $\sigma_I/\sigma_{II} = 0$ [11].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-02-16608) и Президиума РАН (Программа «Физика и механика сильно сжатого вещества и проблема внутреннего строения Земли и планет»).

1. M.I. Daunov, I.K. Kamilov, R.K. Arslanov, D.M. Daunova, S.F. Gabibov, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 2335 (2003).
2. М.И. Даунов, М.С. Буттаев, А.Б. Магомедов, СФХТ **5**, 72 (1992).

3. Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Электронные свойства легированных полупроводников, Наука, Москва (1979).
4. А.Б. Батдалов, Б.К. Чакальский, М.С. Буттаев, А.М. Омаров, в сб.: Транспортные и магнитные явления в оксидах металлов, Махачкала (1989), с. 168.
5. О.В. Григуть, Ю.М. Иванченко, Е.Н. Малышев, П.Н. Михеенко, Ю.Ф. Ревенко, ФНТ **13**, 1083 (1987).
6. В.В. Щенников, ФММ **67**, 93 (1989).
7. И.К. Камиллов, А.Б. Батдалов, М.С. Буттаев, Б.К. Чакальский, СФХТ **4**, 1899 (1991).
8. А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, С.Ф. Габибов, С.Ф. Маренкин, ФТВД **11**, № 4, 61 (2001).
9. L. Tewordt, Th. Wölkhausen, Solid State Commun. **70**, 839 (1989).
10. L. Tewordt, Th. Wölkhausen, Solid State Commun. **75**, 515 (1990).
11. А.Г. Забродский, С.А. Немов, Ю.И. Равич, Электронные свойства неупорядоченных систем, Наука, Санкт-Петербург (2000).

M.I. Daunov, I.K. Kamilov, T.R. Arslanov, A.B. Batdalov, D.M. Kharkunova

ON HEAT CONDUCTIVITY AND THERMO-EMF IN THE REGION OF POLYMORPHIC AND SUPERCONDUCTING TRANSITIONS

A modified method of effective medium, leakage theory and well-known mathematical expressions for heterophase systems were applied to describe thermophysical and thermoelectrical properties of a solid in the region of structural and superconducting transitions. The appropriate formulae are derived. The experimental data are analysed.

Fig. 1. Dependences of $z = \lambda_I/\lambda$ values calculated by formulae (1) (solid curve) and (5) (dash one): a – on β value for relative volume of high-conductive (superconducting) phase $v_c = 0.17$; b – on v values for different β values: 1 – 1, 2 – 0.8, 3 – 0.5, 4 – 0.3

Fig. 2. Temperature dependences of normalized specific resistance ρ (—) and thermo-emf Q (—•—) for relative volumetric part of superconducting phase v in high-temperature ceramic superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$

Fig. 3. Pressure dependences of normalized electrical resistance at fixed temperature of 91.6 K (curve 1), T_c values of midpoint of transition ($p = 1/2p_n$) (curve 2) and calculated by the HSEM model volumetric part of superconducting phase v for values of fitting parameter $n = 14.3$ (curve 3) in high-temperature ceramic superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$

Fig. 4. Temperature dependences of effective heat conductivity λ (solid line), heat conductivity of superconducting phase λ_{II} (dash line) and relative volumetric part of high-conductive phase v in high-temperature ceramic superconductors $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ (a) and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$ (b): ---- – theory, —•— – experiment

Fig. 5. Dependences of normalized specific resistance (1), thermo-emf (2), and heat-conductivity (3) on uniform pressure in n -InAs at 300 K