

PACS: 62.50.+p, 72.20.-i

М.И. Даунов, И.К. Камиллов, 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:

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

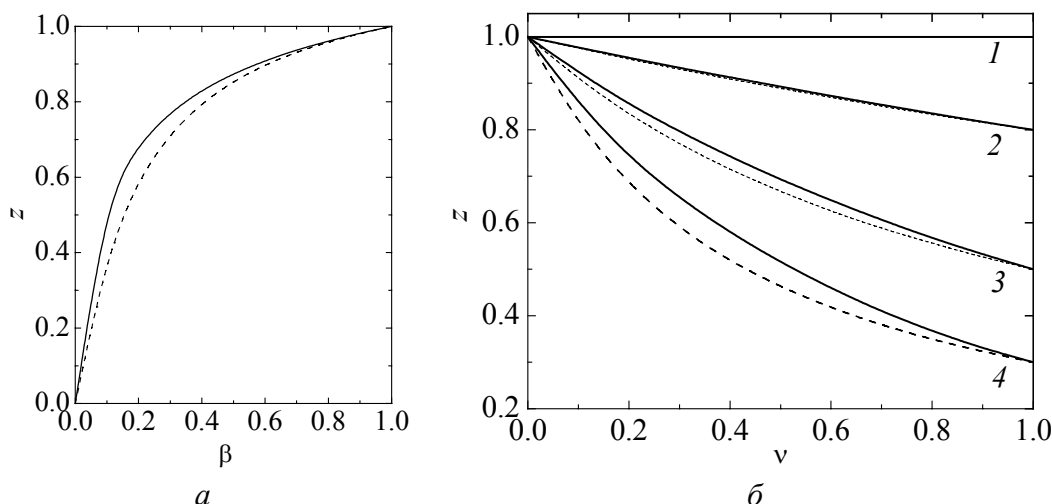
$$\frac{b-\gamma}{1-b} = \frac{\nu}{(1-\nu)} \frac{(x-\alpha)}{(1-x)} \frac{(z-\beta)}{(1-z)\beta}, \quad (2)$$

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

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

Здесь  $x = \sigma_I/\sigma$ ,  $\alpha = \sigma_I/\sigma_{II}$ ,  $z = \lambda_I/\lambda$ ,  $\beta = \lambda_I/\lambda_{II}$ ,  $\gamma = Q_{II}/Q_I$ ,  $b = Q/Q_I$ ;  $\sigma$ ,  $\lambda$  и  $Q$  – эффективные величины электро-, теплопроводности и термоэдс;  $\sigma_I$ ,  $\sigma_{II}$ ,  $\lambda_I$ ,  $\lambda_{II}$ ,  $Q_I$ ,  $Q_{II}$  – электро-, теплопроводность и термоэдс соответственно диэлектрической (низкопроводящей – I) и металлической (высокопроводящей, сверхпроводящей – II) фаз; коэффициенты  $k = (1-\beta) \left[ (1-\nu)^{n+1} - 2(1-\nu)^2 + (1-\nu) \right] + 1$ ;  $B = 3\nu - k + \beta [3(1-\nu) - k]$ ;  $A_I = 1 + 2(1-\beta)(1-\nu)$ ;  $A_{II} = \beta + (1-\beta)(1-\nu)^n$ ;  $\nu$  – 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  $\sigma$  аналогична соотношению (1) с заменой  $z$  на  $x$  и  $\beta$  на  $\alpha$  [1].



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

Теплопроводность в отличие от электропроводности и термоэдс в различных фазах (в частности полупроводниковой  $\lambda_I$  и металлической  $\lambda_{II}$ , нормальной  $\lambda_I$  и сверхпроводящей  $\lambda_{II}$ ) 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)

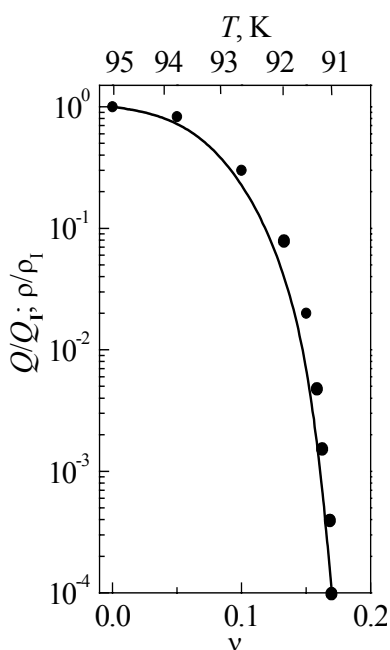
$$b = x, \quad (6a)$$

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]

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



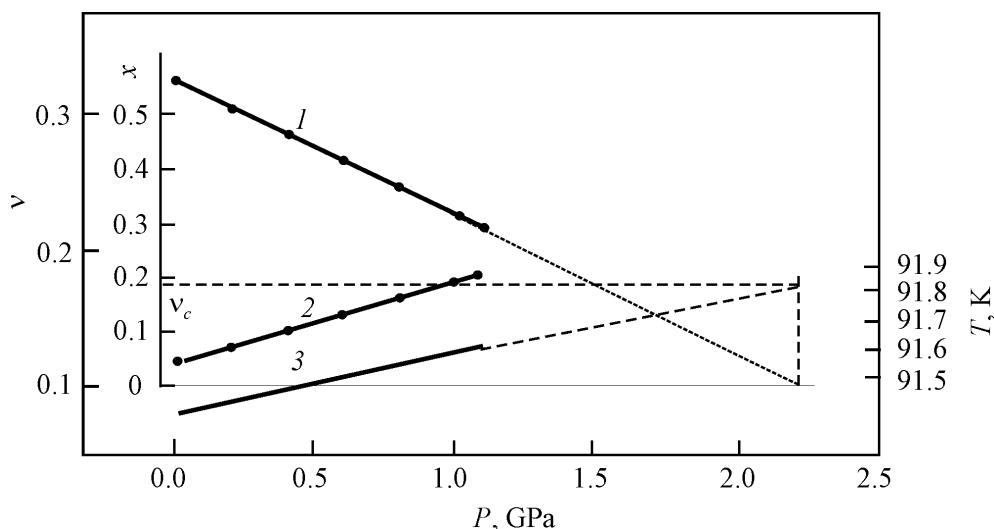
**Рис. 2.** Температурные зависимости нормализованных удельного сопротивления  $\rho$  (—) и термоэдс  $Q$  (---•) от относительной объемной доли сверхпроводящей фазы  $\nu$  в высокотемпературном керамическом сверхпроводнике  $YBa_2Cu_3O_{6.8}$

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).

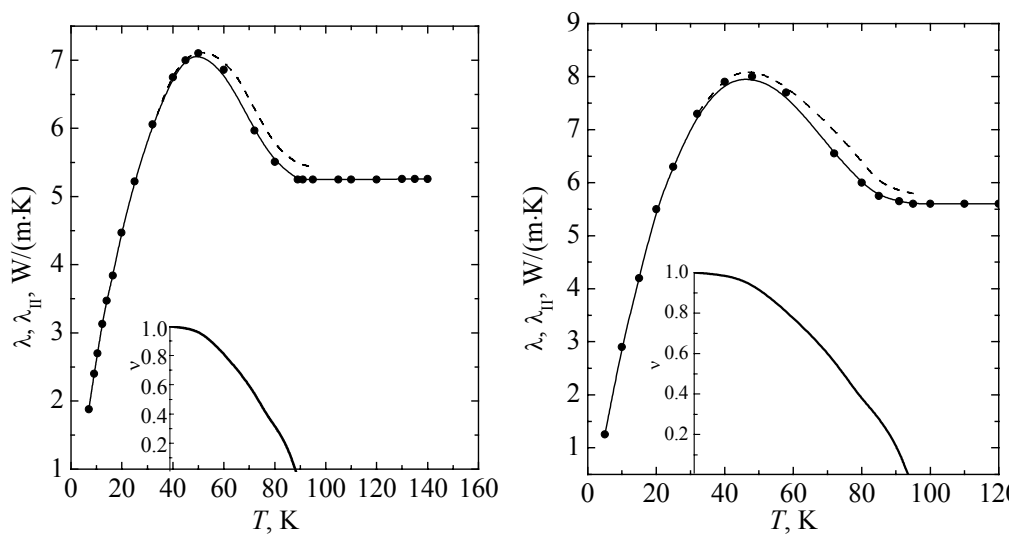
По характеру температурных (рис. 2) и барических (рис. 3) зависимостей удельного сопротивления  $\rho(T)$  и термоэдс  $Q(T)$  при  $T < 100$  К вплоть до критической температуры  $T_c$  в исследованных высокотемпературных сверхпроводниках можно наблюдать возникновение избыточной проводимости  $\sigma^1$  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  $\nu$ : при  $\nu \ll 1$   $\sigma^1 \sim \nu$ ,

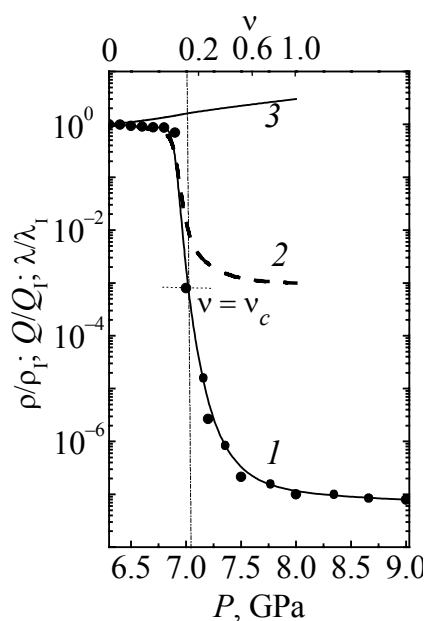


**Рис. 3.** Барические зависимости нормализованного электросопротивления при фиксированной температуре 91.6 К (кривая 1), температуре, соответствующей средней точке кривой перехода ( $\rho = 1/2\rho_n$ ) (кривая 2), и рассчитанной объемной доли сверхпроводящей фазы  $\nu$  для величины подгоночного параметра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



**Рис. 4.** Температурные зависимости эффективной теплопроводности  $\lambda$  (сплошная линия), теплопроводности сверхпроводящей фазы  $\lambda_{II}$  (штриховая линия) и относительной объемной доли высокопроводящей фазы  $\nu$  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  $\nu$  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  $\lambda$ , 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  $\nu$  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  $0 < \nu < 1$ , 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  $\beta$  value for relative volume of high-conductive (superconducting) phase  $v_c = 0.17$ ;  $b$  – on  $v$  values for different  $\beta$  values: 1 – 1, 2 – 0.8, 3 – 0.5, 4 – 0.3

**Fig. 2.** Temperature dependences of normalized specific resistance  $\rho$  (—) 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  $\lambda$  (solid line), heat conductivity of superconducting phase  $\lambda_{II}$  (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