

PACS: 62.50.+p, 72.20.-i

М.И. Даунов, И.К. Камиллов, Т.Р. Арсланов, Д.М. Даунова

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЭФФЕКТИВНОЙ СРЕДЫ
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПОЛИМОРФНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ
ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

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

Статья поступила в редакцию 16 сентября 2004 года

Предлагается метод для расчета объемных относительных долей фаз в критической области полиморфного превращения в твердых телах под давлением. Определены пороговые величины эффективной проводимости и соответствующее ей давление P_c формирования бесконечно протяженной области пространства высокопроводящей фазы. Давление P_c предлагается определить как давление фазового перехода.

1. Введение

Известно, что в реальных твердых телах, являющихся в той или иной степени макроскопически неоднородными, структурные фазовые переходы происходят в конечном интервале возмущающего воздействия, в частности давления [1–9]. Причем интервал давления структурного фазового перехода в твердом теле (до 10 GPa [9]), регистрируемый по данным рентгенографических исследований, совпадает с интервалом скачкообразного изменения электросопротивления (рис. 1) [2,3].

Фазовые переходы I рода в твердых телах протекают таким образом [5–8], что сначала вследствие флуктуаций температуры, давления и наличия дефектов в недрах исходной фазы возникают зародыши новой фазы, которые растут, взаимодействуют и формируют сложную гетерофазную систему. Степень превращения при фиксировании термодинамических условий достигается весьма быстро и далее остается неизменной при сколь угодно длительной выдержке. Относительное количество новой фазы есть функция термодинамических условий превращения (рис. 1). Таким образом, в твердых телах в области превращения реализуется устойчивое двухфазное метастабильное равновесие составляющих систему фаз. Очевидна актуальность разработки метода, в упрощенной форме

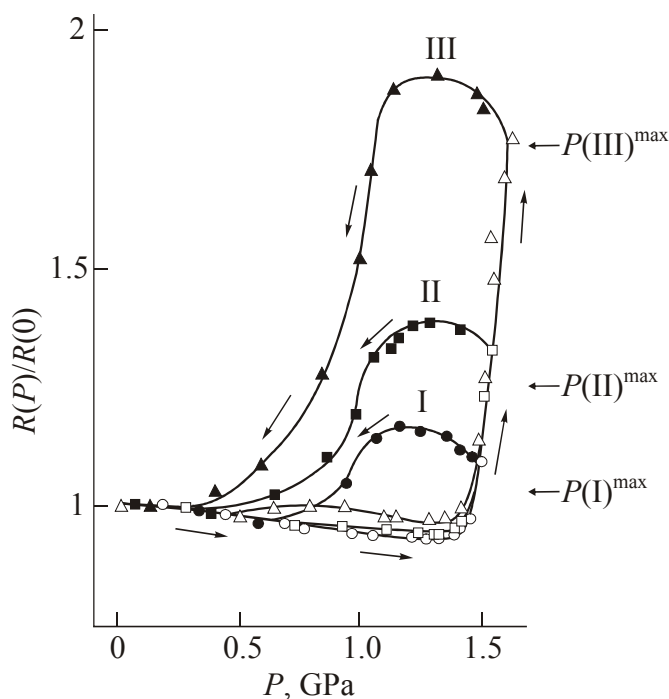


Рис. 1. Зависимость нормализованного сопротивления от давления в SnTe (I, II, III – циклы увеличения (светлые символы) – уменьшения (зачерненные) давления)

отражающего некоторые общие черты поведения твердого тела в критической области превращения под давлением. Этот метод должен позволить оценить характеристические параметры превращения и дать их качественную физическую интерпретацию.

2. Метод эффективной среды

Для описания фазового перехода диэлектрик (низкопроводящая фаза I)–металл (высокопроводящая фаза II) (термины «диэлектрик» и «металл» условны) предлагается использовать модифицированный метод эффективной среды и теорию протекания. В качестве характеристического экспериментального параметра выбрана электропроводность $\sigma(\nu)$ (ν – объемная относительная доля «металлической» фазы), так как методика измерения и задача о вычислении $\sigma(\nu)$ являются простейшими.

Будем исходить из известных выражений для удельного сопротивления в приближении эффективной среды:

$$\rho_{\text{eff}} = \frac{\sum_i \rho_i \nu_i f_i}{\sum_i \nu_i f_i}, \quad f_i = \frac{3\rho_{\text{eff}}}{A_i \rho_{\text{eff}} + (3 - A_i)\rho_i}. \quad (1)$$

Здесь i – номер фазы; A_i – коэффициенты, учитывающие конфигурацию включений фаз; ρ_i и ν_i – соответствующие удельные сопротивления и объемные относительные доли фаз. При коэффициенте A_i , равном 0; 3 и 1, конфигурация фаз соответственно нитевидная (параллельное электрическое соединение фаз), слоистая (последовательное электрическое со-

единение фаз) и сферическая. Предполагается, что коэффициенты A_i различны для разных фаз и зависят от степени превращения, возмущающее воздействие носит изотропный характер, фазовое превращение в кристалле происходит без нарушения сплошности или пластической деформации кристаллической решетки и образец является макроскопически однородным, т.е. отсутствует корреляция в распределении неоднородностей.

При фазовых превращениях $I \leftrightarrow II$ в начальный момент для зародышей фаз II ($I \rightarrow II$) и I ($II \rightarrow I$) адекватным является сферическое приближение и $A_{II} = 1$ ($I \rightarrow II$), $A_I = 1$ ($II \rightarrow I$). Очевидно также, что при $A_I = 3$ ($I \rightarrow II$) и $A_{II} = 0$ ($II \rightarrow I$) формируются соответственно электроизолирующие слои, перпендикулярные и электропроводящие каналы, параллельные электрическому полю. Таким образом, на границах превращений перехода при $I \rightarrow II$ $A_I = 3$, $A_{II} = 1$ и при $II \rightarrow I$ $A_I = 1$, $A_{II} = 0$. Между граничными значениями для коэффициентов A_I и A_{II} использована линейная аппроксимация, которая в случае коэффициента A_{II} усилена введением подгоночного параметра n , учитывающего вероятность формирования бесконечно протяженной области пространства высокопроводящей фазы.

С учетом вышесказанного для $0 \leq \alpha \leq 1$ и $0 \leq v \leq 1$ (где $\alpha = \sigma(I)/\sigma(II)$, $\sigma(I)$ и $\sigma(II)$ – удельные электропроводности I и II фаз, v – объемная относительная доля высокопроводящей фазы II) имеем:

$$A_I = 1 + 2(1 - \alpha)(1 - v); \quad A_{II} = \alpha + (1 - \alpha)(1 - v)^n. \quad (2)$$

Используя соотношения (1) и (2), получим уравнение

$$Ay^2 - By - C = 0. \quad (3)$$

Здесь $A = (3 - k)$, $y = \sigma_{\text{eff}}/\sigma(II)$, $B = 3v - k + \alpha[3(1 - v) - k]$, $C = k\alpha$ (где $k = = (1 - \alpha)[(1 - v)^{n+1} - 2(1 - v)^2 + (1 - v)] + 1$).

Из выражения (3) следует, что при $\alpha = 0$ и $v \rightarrow v_c$ в критической точке, где $y = 0$, коэффициент $B = 0$ и $k = 3v_c$. Отсюда, положив $v_c = 0.17$, определим величину подгоночного параметра $n = 15$ на диэлектрической стороне. Отметим, что в различных континуальных задачах теории протекания и при применении различных численных методов расчета параметр $v_c = 0.15 \pm \pm 0.01$ [10]. Пороговая величина эффективной проводимости при $0 \leq \alpha \leq 1$ в этом случае ($v \rightarrow v_c$) определяется выражением

$$y_c = \frac{\alpha(2 - k_c) + \sqrt{[\alpha(2 - k_c)]^2 + 4\alpha k_c(3 - k_c)}}{2(3 - k_c)}. \quad (4)$$

При $\alpha \neq 0$ и $\alpha \ll 1$ в критической точке коэффициент $B \cong 0$. Учитывая это, можно получить аналитическое выражение для проводимости в критической точке, справедливое для $\alpha < 0.1$ (рис. 2):

$$y_c \cong \sqrt{\alpha} \sqrt{v_c(1 - v_c)} \quad (v_c = 0.17). \quad (5)$$

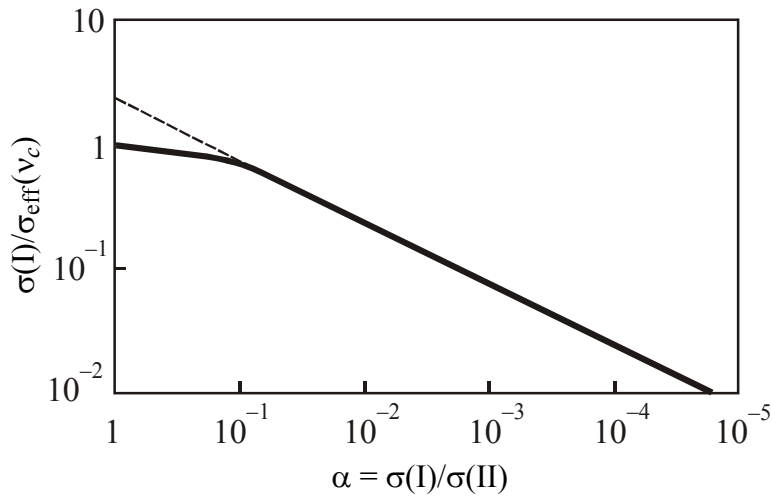


Рис. 2. Зависимость $\sigma(I)/\sigma_{\text{eff}}(v_c)$ от α для $v_c = 0.17$

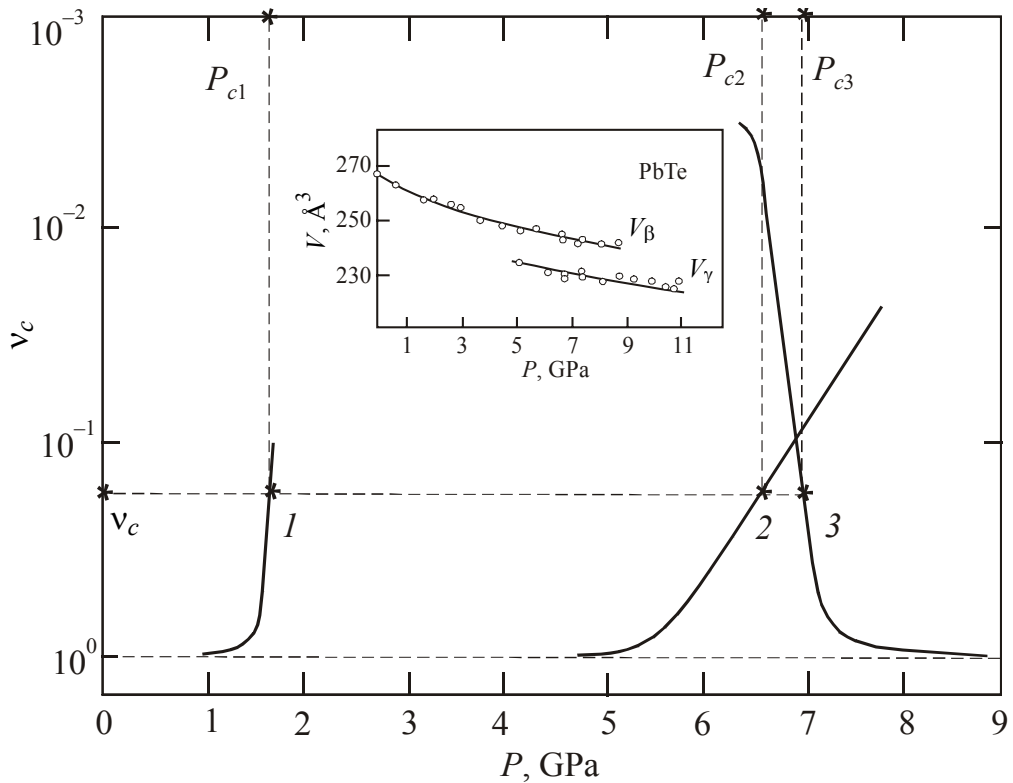


Рис. 3. Зависимости объемных относительных долей фаз от давления в n -HgTe [1] (кривая 1), p -PbTe [2] (кривая 2) и n -InAs [4] (кривая 3). P_{c1} , P_{c2} и P_{c3} – пороговые значения давления для $v_c = 0.17$. На вставке – зависимость объема элементарной ячейки PbTe от давления [3]

На рис. 3 приведены результаты количественного анализа экспериментальных данных в n -HgTe [1], p -PbTe [2] и n -InAs [4], для которых пороговые значения давления P_c соответственно равны, GPa: 1.6; 6.5 и 6.9.

3. Выводы

Таким образом, помимо известных пороговых параметров и критических индексов теории протекания, для описания полиморфного превращения в твердых телах при высоком давлении вводится пороговая величина удельного сопротивления, а соответствующее ей давление $P = P_c$ (где $v = v_c$) предлагается считать давлением фазового превращения.

С этой целью развит способ, являющийся синтезом метода эффективной среды и теории протекания. Уместно отметить, что приближение эффективной среды дает ошибочные результаты в интервале $v_c < v < 0.4$, а теория протекания применима вблизи порога протекания, тогда как формула (3) может быть использована при $0 < v < 1$ и $0 < \alpha < 1$. Давление $P = P_c$ (где $\sigma_{\text{eff}}/\sigma(\Pi) = \sigma_{\text{eff}}^c/\sigma(\Pi)$) предлагается определить как давление фазового перехода.

Презентация результатов осуществлена на Международной конференции НР-2004 (Украина, г. Донецк).

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

1. *J. Blair, A.C. Smith*, Phys. Rev. Lett. **7**, 124 (1961).
2. *G.A. Samara, H.G. Drickamer*, J. Chem. Phys. **37**, 1159 (1962).
3. *С.С. Кабалкина, Н.Р. Серебряная, Л.Ф. Верещагин*, ФТТ **10**, 733 (1968).
4. *А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габибов, С.Ф. Маренкин*, ФТВД **11**, № 4, 61 (2001).
5. *А.Л. Ройтбурд*, УФН **113**, 69 (1974).
6. *А.Л. Ройтбурд*, ФТТ **25** 33 (1983).
7. *А.Л. Ройтбурд*, ФТТ **26** 2025 (1984).
8. *В.Н. Козлов, Г.Р. Умаров, А.А. Фирсанов*, ФТВД вып. 23, 9 (1986).
9. *В.В. Щенников*, ФММ **67**, 93 (1989).
10. *Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос*, Электронные свойства легированных полупроводников, Наука, Москва (1979).

M.I. Daunov, I.K. Kamilov, T.R. Arslanov, D.M. Daunova

APPLICATION OF EFFECTIVE MEDIUM METHOD FOR DESCRIPTION OF POLYMORPHIC TRANSITIONS IN SOLIDS AT HIGH PRESSURE

A method is proposed for calculating the relative volume phase fractions in the critical region of polymorphic transformations in solids under pressure. The threshold values of the effective conductivity and corresponding pressure P_c , at which an infinite domain of

the high-conductivity phase is formed, are determined. It is proposed to define the pressure P_c as the phase transition pressure.

Fig. 1. Dependence of normalized resistance on pressure in SnTe (I, II, III – cycles of pressure increase (light symbols), decrease (shaded symbols))

Fig. 2. Dependence of $\sigma(I)/\sigma_{\text{eff}}(v_c)$ on α for $v_c = 0.17$

Fig. 3. Dependences of volume relative phase parts on pressure in n -HgTe [1] (curve 1), p -PbTe [2] (curve 2) and n -InAs [4] (curve 3). P_{c1} , P_{c2} and P_{c3} – threshold pressure values for $v_c = 0.17$. In the insert – dependence unit cell volume of PbTe on pressure [3]