مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۶، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۳۸۵

فرونشانی ابررسانایی با آلایش Pr در $RBa_2Cu_3O_{7-\delta}$: مفاهیم جایگزیدگی و انبوهه سازی حفره‌ای در صفحات CuO_2

وحید دادمهر[1*]، محمد دهقان نیری[2] و علی رضاخانی طایفه[2]

۱. آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا، گروه فیزیک، دانشگاه الزهراء (س)، کد پستی۱۹۹۳۸۹۱۱۷۶، تهران- ایران
۲. دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، صندوق پستی ۱۶۸۴۴، تهران- ایران
پست الکترونیکی: daadmehr@alzahra.ac.ir

(دریافت مقاله: ۸۵/۳/۶ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۸۵/۸/۱)

چکیده

آلاییدگی سیستم ۱۲۳ با Pr سبب ایجاد ناهنجاریهایی نظیر فرونشانی دمای گذار ابررسانایی می‌شود. در اینجا، ما نشان می‌دهیم که تعمیم نظریه جایگزیدگی حفره‌ای بر پایه مدلسازی هندسی توسط نظریه پرکولاسیون می‌تواند فرونشانی دمای گذار ابررسانایی برای تمام گستره آلاییدگی سیستم ۱۲۳ با Pr را به خوبی توصیف کند. در این مدل مفاهیم اصلی جایگزیدگی و انبوهه سازی حفره‌ای ارائه و نقش بسیار اساسی آن در نزدیکی نقطه گذار فاز بررسی می‌شود به طوری که نمی‌توان از آن در هر محاسبات ویا مدلسازی خاص صرف‌نظر کرد. همچنین، برخی از شواهد تجربی که بر توافق بین شبیه سازی بر پایه اثرات انبوهه حفره‌ای و داده‌های تجربی تأکید می‌کند را فراهم آورده‌ایم.

واژه‌های کلیدی: کوپراتها پایه -Y ، خواص ترابردی، جایگزیدگی حفره‌ای

۱. مقدمه

با کشف ابررساناهای دمای بالا سری ۱۲۳، تحرک تازه‌ای در حوزه ابررسانایی رخ داد، که مبنای آن بیان توصیف قابل قبول برای این پدیده بود. از آنجا که دمای گذار ابررسانایی T_C برای ابررساناهای دمای بالا با نظریهٔ BCS تضاد کامل داشت، به نظر می‌رسید مبنای فیزیکی دو پدیده تفاوتهای بنیادی با هم دارد. از این جهت گروههای متفاوتی، آزمایشهای زیادی را روی ترکیبات مختلف ازجمله $RBa_2Cu_3O_{7-\delta}(R-۱۲۳)$ (R به معنی عناصر لانتانید) انجام دادند [۱-۹]. در این میان مشخص شد که فقط Pr-۱۲۳ عایق بوده و ابررسانا نمی‌شود. بدین سبب توجه بیشتر محققین به این سری ترکیبات متوجه شد که احتمالاً با درک تفاوت بین Pr و سایر لانتانیدها و تعیین مشخصه‌ای از آن که باعث این رفتار پیچیده در ترکیبات R-۱۲۳ می‌شود، می‌توان فیزیک ابررساناهای دمای بالا را بهتر درک کرد. به این ترتیب آزمایشات زیادی روی ترکیبات R-۱۲۳ انجام و مقایسه کسر مولی مختلف Pr و O مورد آزمایش قرار گرفت [۱]. از طریق آزمایشها و محاسبات الکترونیکی سطح روشن شد که چگالی حفره‌ها در صفحات CuO_2 نقش حائز اهمیتی در ابررسانایی دارد و با کاهش چگالی حفره‌ها فرونشانی ابررسانایی رخ می‌دهد و آلاییدگی حفره‌ای (الکترونی) در سیستم ۱۲۳، چگالی حفره‌ها را در صفحات CuO_2 افزایش (کاهش) می‌دهد که افزایش چگالی حفره‌ها در این صفحات افزایش T_c را به دنبال دارد [۸ و ۱۰]. به این ترتیب به نظر می‌رسد فیزیک مسئله بر پایه چگالی حفره‌ها در صفحات CuO_2 قرار داشته و چگالی حفره‌ها پارامتر اساسی در فرونشانی ابررسانایی است. اما در میان

لانتانیدها این تنها Pr است، که وجود آن در ترکیبات R−۱۲۳ سبب می‌شود که چگالی حفره‌ها در صفحات CuO_2 کاهش یابد [۸]. از طرفی آلایش Ca در ترکیب R−۱۲۳ سبب افزایش چگالی حفره‌ای و افزایش T_c می‌گردد [۱۰]. لذا چگالی حفره‌ها نقش به‌سزایی در نمود و کاهش آن در فرونشانی ابررسانایی دارد. با این جمع بندی به نظر می‌رسد، کلیه تحقیقات متوجه تفاوت بین Pr و سایر لانتانیدها است. بررسی این تفاوت را می‌توان به دوگونه انجام داد: یکی محاسبات الکترونیکی سطح و محاسبه تفاوت اثر Pr و سایر لانتانیدها و انجام آزمایشها برای دستیابی به نتایج مشابه و دوم بررسی فیزیک مسئله از دیدگاه هندسی و به دست آوردن هندسهٔ سازگار با موضوع و جستجو برای یافتن فیزیکی در چهارچوپ این هندسه. در خصوص تأثیر آلایش Pr در ساختار ۱۲۳، نظریه‌های متنوعی از جمله نابجانشینی Pr [۱۱] ، جایگزیدگی حفره‌ها در هیبریداسیون اوربیتال $2p$ اکسیژن و $4f$، Pr [۱۲، ۱۱، ۱۵و ۱۶]، پرشدگی حفره‌ای [۱۴ و ۱۳] و شکست جفت [۱۱و ۱۷] ارائه شده‌اند. علاوه بر این نظریه‌ها تلاشهایی در جهت استفاده از ترکیبی از این نظریه‌ها شده است. تعدادی از محققین پیشنهاد کرده بودند که اثر همزمان پرشدگی حفره‌ها و شکست جفت می‌تواند فرونشانی این گذار فاز را توجیه کند که با شکست مواجه شد [۱۸].

ما سعی داریم به کمک نظریه پرکولاسیون، ناهنجاریهای Pr را با کمک نظریه‌های مذکور و معرفی امکان تشکیل جزیره‌های حفره‌ای[۱] ، مسئله را توضیح دهیم. یعنی این امکان پیش می‌آید که حفره‌های متحرک در کمربندی از سلولهای عایق شامل Pr گرفتار شوند. به این ترتیب از جمع حفره‌های متحرک در سیستم حذف می‌شوند و نشان خواهیم داد که جایگزیدگی حفره‌ای و امکان تشکیل جزیره‌ای از حفره‌ها می‌تواند فرونشانی ابررسانایی و کاهش چگالی حفره‌های صفحات CuO_2 را تبیین کرده و گذار فازی را پیش‌بینی کنند. بررسیهای اولیه ما حاکی از آن بود که تئوری پرکولاسیون دو بعدی تحت شرایط ویژه می‌تواند نتایج تجربی را به خوبی توصیف کند و از طرفی ما با معرفی جزیره‌های حفره‌ای و این نکته که به وجود آمدن این جزیره‌ها در هنگام گذار و نقش آنها در کاهش ناگهانی چگالی حفره‌ها منجر به دو پله‌ای شدن گذار فاز ابررسانا- عایق می‌گردد را توضیح می‌دهیم. در این مقاله سعی داریم با بررسی سازگاری هندسهٔ مسئله، با فرضیات فیزیکی مطرح شده، ماهیت فرونشانی ابررسانایی را بهتر درک کنیم.

۲. جزئیات و فرضیات محاسباتی

در واقع، مسئله عایق و رسانا است، بدین ترتیب که یک شبکه از نقاط عایق و رسانا تشکیل می‌شود، که با احتمال p سامانه‌ها رسانا می‌شود. در این مسئله با افزایش p کم‌کم خوشه‌های رسانا تشکیل می‌شود، که با افزایش p اندازه این خوشه‌ها بزرگتر شده تا آنجا که ابعاد آنها به ابعاد سیستم می‌رسد. در این حالت یک خوشه رسانا خواهیم داشت که مرزهای سیستم را به هم متصل نموده و کل سیستم به فرم رسانا در می‌آید و این مرحله گذار فاز عایق – رسانا نامیده می‌شود، که در $p_c \approx ۰/۶$ رخ می‌دهد [۱۹]. در حالت واقعی سیستم اندازه بسیار بزرگی دارد و تعداد سامانه‌ها به بینهایت میل می‌کند. اما در عمل در محاسبات کامپیوتری برای به دست آوردن جوابهای واقعی رفتار جواب برحسب اندازه سیستم را بررسی می‌نماییم و بعد از پشت سر گذاشتن حد ترمودینامیکی، با برونیابی جواب در اندازه واقعی سیستم (اندازه بینهایت) را به دست می‌آوریم. جالب توجه است که در $p \sim p_c$ خوشهٔ حاصل از سامانه‌های رسانا با اندازه بی‌نهایت ظاهر می‌شوند بدین معنی که ابعاد خوشه‌های حاصل از سلولهای رسانا به سمت ابعاد سیستم میل می‌کند و این خوشه تمام سطح سیستم را می‌پوشاند. اما به شکل بسیار متخلخل و با تعداد عناصر سطحی محدود که سهم خوشه بی‌نهایتی نسبت به کل سامانه‌های رسانا در $p \sim p_c$ بسیار کوچک است. در نتیجه ما یک ساختار فراکتالی با بعد اندکی بیش از ۱ [۱۹] داریم که در $p \sim ۱/۰$ بعد آن به ۲ می‌رسد. افزایش سهم سطحی خوشه‌ها در نزدیکی نقطه گذار فاز رفتار توانی است و به ما یک نمای بحرانی می‌دهد، که به دست آوردن آن در مدل پرکولاسیونی که برای توصیف

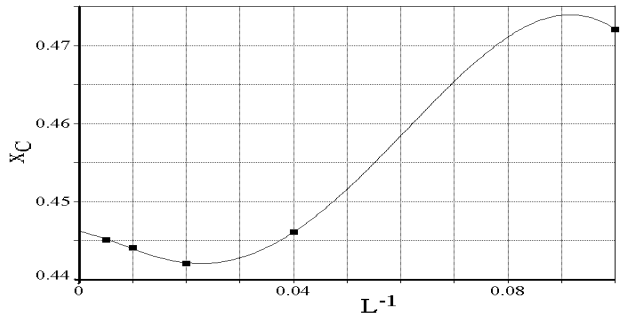
۱.Hole Nucleation

ناهنجاریهای آلایش Pr در ساختار ۱۲۳ بیان خواهد شد، رفتار سیستم را تبیین می‌کند [۱۹-۲۲]. ما نمی‌توانیم ابعاد واقعی سیستم را برای مدلسازی انتخاب کنیم و ازطرفی، در مدلهای ما نسبت سلولهای مرزی به سلولهای داخلی خیلی بزرگتر از مقدار واقعی آن خواهد بود و همین موضوع جوابها را با خطا مواجه می‌کند. برای حل این اثر، مسئله را برای چند اندازه متفاوت حل کرده و سپس با برون یابی جواب واقعی مسئله را پیدا می‌کنیم. همچنان که در شکل ۱ مشاهده می‌شود برای ابعاد شبکه بزرگتر از ۵۰×۵۰ مدل، مشابه حد ترمودینامیکی رفتار می‌کند.

ساختار شبکه ۱۲۳ -Gd/Pr از دو صفحه CuO_2 تشکیل شده، که در آن Pr به طور کاتوره‌ای جایگاه Gd را اشغال می‌کند. به این ترتیب سیستم را می‌توان به صورت صفحات دو بعدی تصور کرد، که Pr به طور کاتوره‌ای در جایگاه Gd نشسته است (شکل ۲). البته با این فرض که توزیع Pr نسبت به صفحه CuO_2 یکنواخت باشد، لذا احتمال یافتن Pr به جای Gd در هر سل CuO_2، x خواهد بود. هر مربع متشکل از چهار یون Cu و چهار یون O که با R از نظر هندسی به صورت شکل ۲ (راست) مرتبط هستند را یک سل می‌نامیم. در مدل پرکولاسیون گذار رسانا- عایق در $p_c \sim ۰/۶$ مشاهده می‌شود، که در آن p احتمال یافتن سل رسانا است، خوشه‌های رسانا تا ابعاد بینهایت رشد می‌کنند و مدل رسانا می‌شود [۱۹]. در اینجا $p \approx ۱-x$ خواهد بود، لذا خواهیم داشت $x_c \sim ۰/۴$. آزمایشها نیز نشان می‌دهد که گذار ابرسانا- عایق در $x_c \sim ۰/۴۶$ رخ می‌دهد [۸].

اعمال نظریه‌های مختلف جنبه‌های تأثیرگذاری یون Pr بر پدیده ابررسانایی و فرونشانی آن، از طریق محاسبه چگالی حفره‌های موجود در صفحات CuO_2 انجام می‌پذیرد. تناظر چگالی حفره‌ای صفحات CuO_2 و دمای گذار ابررسانایی در مراجع [۱، ۸ و ۹] بحث شده است. در اینجا فرضیات مطابق با هر نظریه در الگوریتم برنامه در نظر گرفته شده است. این فرضیات عبارتند از:

۱- یونهای اکسیژن در صورتی که دو همسایگی آنها با Pr پر شده باشد، دامی برای حفره‌های متحرک محسوب می‌شوند



شکل ۱. مطالعه رفتار x_C با تغییر طول شبکه، نشان می‌دهد برای $L > ۵۰$ در حد ترمودینامیکی هستیم.

و یک حفره متحرک را جایگزیده می‌کنند [۱۱، ۱۲ و ۲۳].

۲-یک سل عاری از آلایش را به عنوان سل رسانا تلقی می‌کنیم که به طور موضعی یک سل بدون آلایش با مقدار چگالی حفره‌ای گزارش شده ۰/۲۵ ابررسانا خواهد بود [۱۱، ۱۲ و ۲۳].

۳-حضور Pr به جای Ba نیز سلولهای ابررسانا را به عایق تبدیل می‌کند [۲۴].

۴-تمایل R ها برای ایجاد خوشه‌های مستقل با افزایش اندازه یون R افزایش می‌یابد و برای یونهای بزرگ باید این اثر لحاظ شود، اما برای Pr وGd به دلیل کوچکی شعاع یونی آنها از این اثر صرف‌نظر می‌کنیم و توزیع را کاملاً یکنواخت می‌گیریم [۱۱، ۱۲ و ۲۵].

۵-در ۱۲۳ -Gd با اکسیژن کامل $(\delta = ۰, x = ۰)$ $n_{mh} = ۰/۲۵$ است [۱۱، ۱۲، ۲۶]. از طرفی، ترکیب در مقدار $\delta = ۰/۵$ ساختار ۱۲۳ گذار فاز ساختاری ارتورمبیک به تتراگونال را دارد، بدین معنی که نمونه دارای فاز ساختاری تتراگونال بوده و عایق است [۲۷]. لذا این اثر را می‌توان به صورت رابطه خطی $n_{mh} = ۰/۲۵ - \delta/۲$ فرض کرد [۱].

۶-در واقع ما سلهای صفحات CuO_2 را به دو دسته تقسیم کرده، دسته اول آنهایی که حاوی یون R و دسته دیگر حاوی یون Pr هستند که اگر در سلهای همسایه آنها یون Pr وجود نداشته باشد، گروه ابررسانایی را تشکیل خواهند داد و آنها را سامانه S مینامیم. دسته دوم سلهای حاوی Pr هستند که اگر در همسایگی آنها حداقل یک Pr وجود داشته باشد عایق می‌شوند و این دسته را سامانه N می‌نامیم. مجموعه‌ای از سامانه‌های S

متصل به هم، خوشه S و مجموعه‌ای از سامانه‌های N متصل به هم خوشه N را تولید می‌کنند (شکل ۲).

۷- از اثر تونل زنی جوزفسون، که باعث می‌شود خوشه‌هایی که به وسیله کمربند سلهای عاری از حفره از هم جدا شده‌اند و به طور ضعیف به هم مرتبط می‌شوند صرف‌نظر می‌کنیم [۲۸].

۸- هر دو Pr که روی دو سل مجاور قرار گیرند، می‌توانند حفره متحرک را به دام اندازند. اما از نظر فیزیکی خلاف انتظار ماست که در یک سل چهار حفره به دام بیفتند، زیرا که در عمل عوامل دیگری ازجمله اثر دافعه کولنی بین حفره‌ها غلبه می‌کند و این احتمال را کاهش می‌دهد [۱۱].

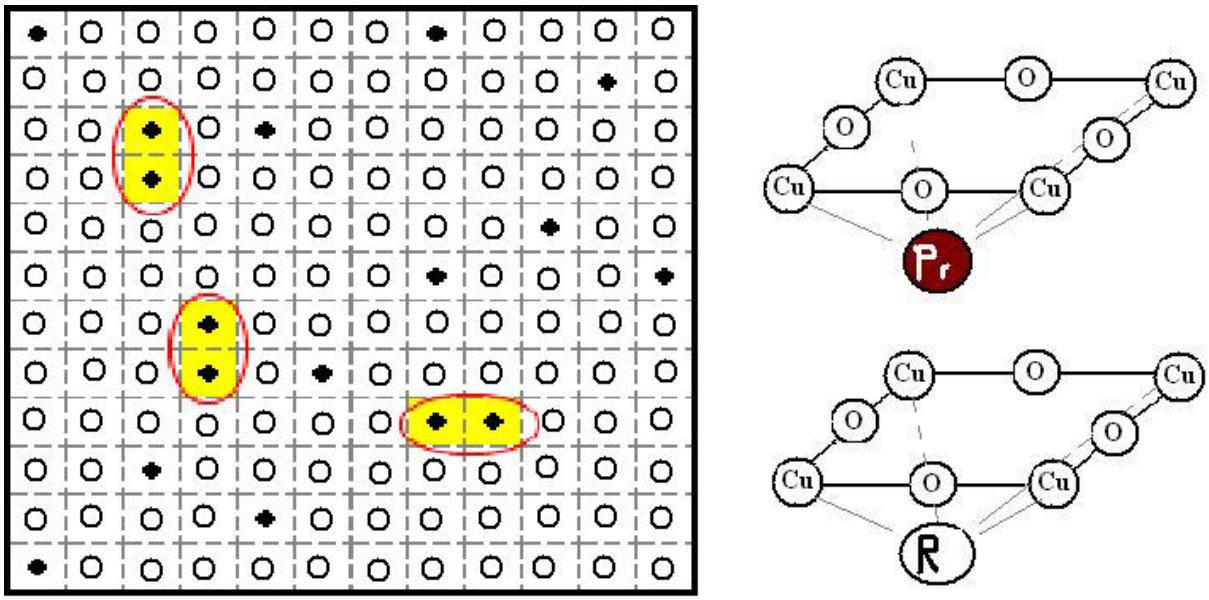
۳. بحث و بررسی نتایج

در اینجا ما صرفاً توجه خود را به طیفی از ابررساناهای دمای بالا معطوف می‌کنیم که در رده ترکیبات ۱۲۳ – R قرار می‌گیرند و T_c در ۱۲۳ – Y ، ۱۲۳ – Gd و ۱۲۳ – Nd در محدوده ۹۴°K ~ ۹۲ گزارش شده است [۸، ۲۹ و ۳۰]. نکته جالب توجه این است که در این بین تنها Pr است که ساختار ارتورومبیک ۱۲۳ را ایجاد می‌کند ولی ابررسانا نیست [۸]. البته با کاهش اکسیژن در این ترکیبات گذار فاز ساختاری Orthorhombic - Tetragonal (O - T) نیز رؤیت می‌شود [۱]، که بین همه ترکیبات ۱۲۳ – R مشترک است. این نکته بسیار جالب است چرا که تفاوتی در یک خانواده از عناصر جدول تناوبی ظاهر شده و در عین حال این تفاوت نمی‌تواند از ساختار شبکه و یا اندازه اتمها ناشی شده باشد چون از این جهت تفاوتی بین Pr و سایر لانتانیدها دیده نمی‌شود و به نظر می‌رسد که اگر به درستی این تفاوت درک شود، بتوانیم گامی در تبین علت ابررسانا بودن سایر ۱۲۳ – R ها برداریم. به این جهت آزمایشات زیادی از طرف گروههای متعددی از محققین بر روی ترکیبات مختلف این عناصر به همراه کسر مولی متفاوتی از Pr انجام شد، تا تفاوت بین آنها و Pr روشنتر گردد [۸]. موازی با این آزمایشها، محاسبات نیز نشان داد بین تغییر فاز و چگالی حاملها در صفحات CuO_2 ارتباط نزدیکی وجود دارد [۱]. آزمایشها نشان دادند کاهش n_{mh} چگالی حفره‌های متحرک در صفحات CuO_2 و فرونشانی دمای گذار ابررسانایی با هم مرتبط هستند [۱، ۹-۷]. لذا به نظر می‌رسد بخش عمده‌ای از مسئله پیدا کردن علت این تابعیت و فرمالیزه کردن آن باشد. اما نکته در اینجاست که فیزیک این مسئله کماکان به درستی مورد تأیید نیست و تردیدهای زیادی وجود دارد و هر آزمایش نتایج خاص خود را به دنبال دارد و در عین حال هیچ الزامی وجود ندارد که این پدیده تنها یک عامل داشته باشد و این بر پیچیدگی موضوع نیز می‌افزاید. راه‌حل غالب آن است که با مطرح کردن یک فرض، مدلی ارائه و حل شود و یا با استفاده از مدلهای از پیش تعریف شده در بخشهای دیگر فیزیک، تخمینهایی اعمال کرده و صحت فرض اولیه بررسی شود. راه‌حلی که ما ارائه کرده‌ایم، نگاه کردن به هندسه مسئله و به دست آوردن نتایج با فرضهای اندک و تنها برپایه هندسه است. به این ترتیب می‌توان فرضیات فیزیکی را صرفا با این دیدگاه که با هندسه سازگاری دارند و یا خیر، مهم و یا بی اهمیت تلقی کرد. البته مزیت دیگر در اینجاست که پاره‌ای از خصوصیات مهم، صرفاً بر پایهٔ فرضیات هندسی قابل توجیه بوده و نیازی به صرف وقت برای توجیه آنها برپایه جزئیات فیزیکی نخواهد داشت. در این مسئله می‌توان کلیه بررسیها را روی یکی از لانتانیدها مثلاً Gd و Pr متمرکز کرد چرا که برای سایر لانتانیدها T_c با کاهش اندازه یون افزایش می‌یابد [۳۱]. در ۱۲۳ – Gd آلائیده با Pr گذار فلز به عایق (MIT)[1] در مقدار بحرانی آلایش $xc \sim$ ۰/۴۵ مشاهده شده است و این گذار کماکان در تمامی ساختارهای ۱۲۳ که با Pr آلاییده شوند، در مقادیر x_c خاصی ازجمله ۰/۳۲ برای ۱۲۳ – Nd و ۰/۶۰ برای ۱۲۳ Y مشاهده می‌شود [۸]. از طرفی دیگر اثر کمبود اکسیژن[2] نیز فرونشانی ابررسانایی را به همراه دارد [۱]. اگرچه کاهش اکسیژن در زنجیره‌های ساختار رخ می‌دهد، اما انتقال بار به سمت صفحات CuO_2 بر چگالی بار حفره‌ها در این صفحات تأثیر می‌گذارد [۳] و در نتیجه دمای گذار ابرسانایی که با چگالی حفره‌ها در صفحات CuO_2 در ارتباط است فرونشانده می‌شود [۱ و ۱۱].

---

۱. Metal Insulator Transition

۲. Oxygen Deficiency



شکل ۲. راست) وضعیت یونهای Pr و R نسبت به صفحه CuO_2. چپ) سلهای رنگی نقاطی را نشان می‌دهند که در آنها حفره‌ها جایگزیده شده‌اند.

لذا کمبود اکسیژن در سیستم ۱۲۳ نیز با کاهش چگالی حفره‌ها در صفحات CuO_2 همراه خواهد بود. اثر همزمان کمبود اکسیژن و آلایش Pr در سیستم Gd – ۱۲۳ در کار قبلی ما به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته است و همبستگی x و δ در فرونشانی ابررسانایی به دست آمده است [۱].

چگالی حفره‌ها در سطح CuO_2، تعداد حفره‌های متحرک تقسیم بر سطحی که در آن قابلیت تحرک دارند تعریف می‌شود یعنی (n_{mh}/f_S) که n_{mh} چگالی حفره‌های متحرک و f_S نسبت سطح سلهای ابررسانا به سطح کل صفحه CuO_2 است. ولی در عمل n_{Exp} با استفاده از اثر هال اندازه‌گیری می‌شود (شکل ۴)، لذا از دانش اولیه اثر هال داریم:

$$n_{Exp} = \frac{Bi_{Exp}}{etV}, \qquad (۱)$$

که در آن t ضخامت تیغه، B میدان مغناطیسی، e بار حامل و V ولتاژ هال و i_{Exp} جریان اعمال شده می‌باشد. با توجه به اینکه رابطهٔ (۱) برای رسانای یکنواخت به دست آمده است، برای تیغه‌ای که سهم سطح رسانا به کل سطح آن f_S باشد خواهیم داشت.

$$n_{mh} = \frac{Bi_{Exp}}{etVf_S} = n_{Exp}/f_S \ . \qquad (۲)$$

در نتیجه برای مطابقت با نتایج تجربی می‌بایست برابری $n_{Exp} \sim n_{mh} f_S$ را بررسی کنیم.

با فرض پخش کاتوره‌ای اتمهای Pr در سطح صفحات CuO_2، احتمال داشتن همسایه برای یک سل CuO_2 شامل Pr، $4x^2$ خواهد شد، با توجه به اینکه حفره جایگزیده به دو سامانه همسایه تعلق دارد، برای چگالی حاملها مقدار n_{mh} به صورت زیر پیش‌بینی می‌شود.

$$n_{mh} = 0.25 - 2x^2 \ . \qquad (۳)$$

از طرفی می‌توان سهم سطح کلی خوشه‌هایی را، که به این ترتیب عایق نشده‌اند، یعنی f_S، را حساب کرد.

$$f_S = (1-x) + x(1-x)^4 \ . \qquad (۴)$$

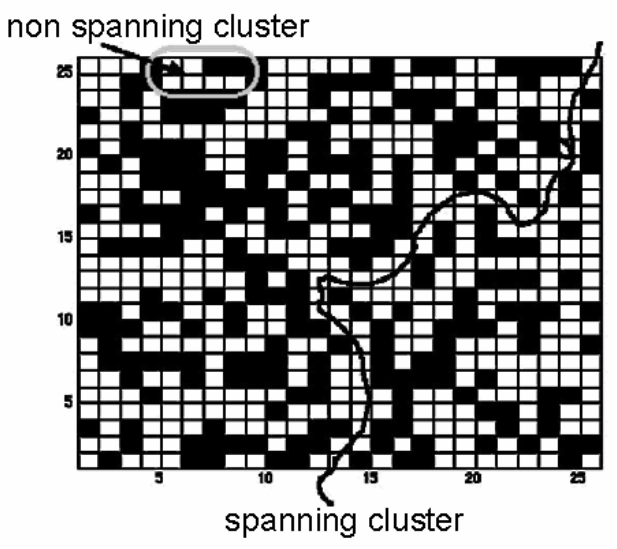
به این ترتیب احتمال وجود سامانه‌ای ابررسانا f_S خواهد بود. حال به‌کمک مدل ساده پرکولاسیون رسانا- عایق که گذار فاز $p_c \sim 0.6$ را پیش‌بینی می‌کند نتیجه می‌گیریم، که برای $f_S \sim 0.64 \Leftarrow x_c \sim 0.45$، که با نتایج آزمایشگاهی نیز همخوانی دارد.

اثر جایگزیدگی حفره‌ها با افزایش میزان آلایش Pr افزایش می‌یابد و به دلیل افزایش دافعهٔ کولنی در $n_{mh} \approx 0.15$ تأثیر خود را از دست می‌دهد [۱۱]. اما با دقت بیشتر ملاحظه می‌شود

که با افزایش x چگالی حفره‌های غیر متحرک در ناحیه عایق کم‌کم افزایش می‌یابد، در عمل حفره‌ها اجازه حرکت و ایجاد جریان را دارند، اما به طور جمعی نمی‌توانند به بخشی از شبکه مهاجرت نموده و عدم توازن بار را به وجود آورند، چرا که این مخالف اثر پتانسیل کولنی است ولی در xهای کوچک چنین اثری ظاهر نمی‌شود. اما در xهای بزرگتر، $n_{mh} <$ ۰/۱۵، در مدل اجباراً کاهش بسیار شدید توزیع چگالی حفره‌ها را در مناطق غیر عایق به وجود می‌آورد. این عدم تقارن در توزیع بار برای وقتی شعاع R و Pr تفاوت زیادی دارند، در xهای کوچکتر نیز ظاهر می‌شود و به این ترتیب اثر بیشتری خواهد داشت و در نتیجه انتظار داریم برای آنها اندکی بزرگتر از ۰/۱۵ نیز باشد. به همین دلیل فرض جایگزیدگی تنها در xهای کوچک توضیح مناسبی را ارائه می‌دهد. براین اساس ما فرض جایگزیدگی را تنها تا $n_{mh} \geq$ ۰/۱۵ اعمال می‌کنیم. حذف ناگهانی فرض جایگزیدگی، اگرچه یک تخمین است اما جواب مناسبی به دنبال خواهد داشت. چرا که در عمل تشکیل جزیره‌های حفره‌ای پدیدهٔ جایگزیدگی را شامل خواهد بود و چگالی حفره‌های متحرک را به سرعت کاهش می‌یابد. بستگی مدل به نوع اتمهای R نیز از این دیدگاه تجربی ناشی می‌شود که هرچه اختلاف اندازه اتم R و Pr بیشتر باشد، سرعت افت اولیه چگالی حفره‌ها بر حسب x بیشتر خواهد بود. از طرفی آزمایشها نشان داده است که هر چه اختلاف اندازه اتمهای R و Pr بزرگتر باشد تمایل این اتمها برای تشکیل خوشه‌های یکپارچه بیشتر می‌شود و فاز مجزاتری از هم را اختیار می‌کنند [۳۱]. در نتیجه در مدل پرکولاسیون تنها برای اتمهایی مثل Y می‌توانیم توزیع را برای Pr کاملاً اتفاقی انتخاب کنیم. برای وارد کردن این اثر، انتخاب R و یا Pr برای یک سامانه از سلول، که روی انرژی سیستم مؤثر است، می‌توان مقدار این تأثیر را به طور تخمینی از انرژی یونیزاسیون E_{ion} و مدول یانگ اتم (y) به دست آورد.

$$\mathrm{E} = E_{ion} - y \,. \qquad (۵)$$

حال احتمال قرار گرفتن دو اتم ناهمجنس در کنار هم متناسب با $e^{-(\mathrm{E_{Pr}}-\mathrm{E}_R)/KT}$ خواهد بود که T در این رابطه دمای



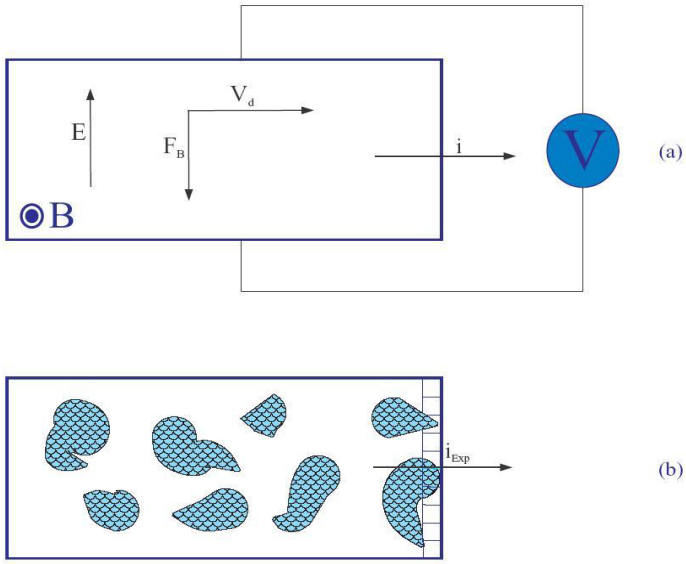
شکل ۳. انواع خوشه‌ها : سلهای مشکی معرف سلولهای آلاییده با Pr (سل N) و سلهای سفید معرف سلولهای غیر آلاییده (سل S) هستند.

ساخت در مرحله کلوخه سازی است. در مجموع رابطهٔ احتمال را بعد از بهنجارش به فرم زیر می‌نویسیم.

$$p_{\mathrm{Pr}-R} = \frac{e^{-\Delta \mathrm{E}/KT}}{1 + e^{-\Delta \mathrm{E}/KT}} \,. \qquad (۶)$$

در نتیجه احتمال کنار Pr قرارگرفتن عناصر مختلف لانتانیدها به کمک رابطه ۶ محاسبه می‌شود.

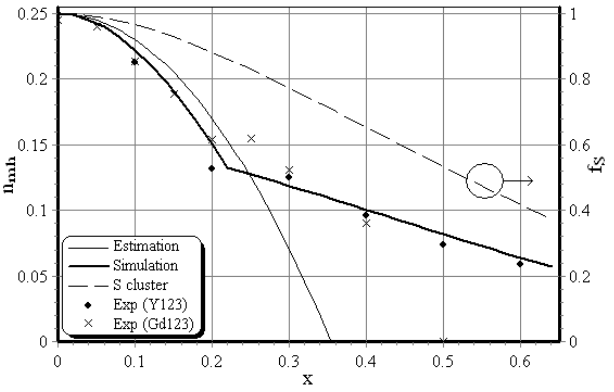
در مقدار آلایشهای بیشتر کم‌کم خوشه‌های N بزرگتر می‌شوند. این خوشه‌ها دو دسته هستند، خوشه‌های کوچکتر که معمولاً توپر هستند و کلیه حفره‌های داخل آنها جایگزیده خواهند بود و دسته دوم خوشه‌هایی توخالی، که بیشتر کمربندی از سلهای N هستند، که مجموعه‌ای از سلهای S حاوی حفره‌های متحرک را دربر می‌گیرند (شکل ۳). به وضوح مشاهده می‌شود حفره‌های داخل این چنین کمربندهایی قابلیتهای رسانشی خود را عملاً از دست داده و حفره جایگزیده به حساب می‌آیند *(non spanning cluster)*. ما این اثر را جزیرهٔ حفره‌ای می‌نامیم. همچنان که x به x_c نزدیک می‌شود تعداد خوشه‌ها از نوع دوم به شدت افزایش یافته و کاهش سریع چگالی حفره‌های متحرک را به دنبال دارد و کلیه حفره‌های متحرک، در کمربندی از سلهای N که کل سیستم را دربر می‌گیرد احاطه می‌شوند (شکل ۳). این



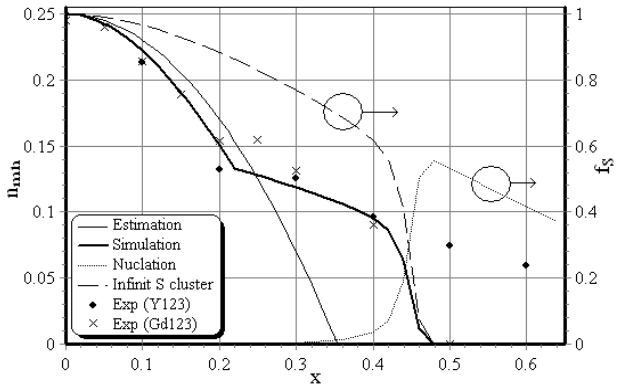
شکل ۴. الف) نمایش اثر هال. ب) تیغه‌ای با خوشه‌های نارسانا که باعث می‌شود جریان نسبت به حالت رسانای یکنواخت کاهش پیدا کند. در صورتی که سهم رسانا به کل سطح f_S باشد، خواهیم داشت $i_{\exp} = i \times f_S$.

نقطه همان نقطه‌ای است که گذار ابررسانا- عایق مشاهده می‌شود. به نظر می‌رسد که بتواند تیزی افت T_c را در نزدیکی گذار تبین کند. البته نکته قابل دقت در اینجاست که با کاهش n. و رسیدن آن به یک حد n_{mh} که در ترکیبات مختلف $R-123$ متفاوت است گذار فاز رخ می‌دهد، به طور تجربی نیز در ترکیبات مختلف هم این گذار فاز در نقاط مختلف رخ می‌دهد [۲۴].

در شکلهای ۵ و ۶ نتایج به دست آمده بر اساس تئوری پرکولاسیون به‌کمک محاسبات عددی نمایش داده شده است. نکته قابل توجه اینجاست، که با افزایش x چگالی حفره‌های متحرک کاهش پیدا می‌کند. اما در مقابل اثر دافعه کولنی نیز کم کم افزایش می‌یابد تا آنجا که مانع جایگزیدگی بیشتر حفره‌ها می‌شود. از این مرحله به بعد ما صرفاً اثر ضریب f_S را در نظر می‌گیریم و چگالی حفره‌ای را با توجه به اثر دافعهٔ کولنی ثابت فرض می‌کنیم. زیرا به دلایل زیر اثر جزیرهٔ حفره‌ای حاکم بر رفتار سیستم خواهد بود: اولاً احتمال تحقق نابجانشینی Pr کمتر از ۱٪ است [۲۵ و ۳۲]، ثانیاً اثر پرشدگی حفره‌ای باعث کاهش چگالی حفره‌ها می‌گردد اما نمی‌تواند نتایج تجربی را توصیف کند [۱، ۱۱ و ۳۳] و ثالثاً شکست جفت و حتی همزمان با پرشدگی حفره‌ای نمی‌توانند دو پله‌ای شدن و گذار فاز ابررسانا- عایق را توجیه کند [۲۴] ولی هر مقدار که از این اثرات در فرونشانی مؤثر باشند می‌توانند مشابه اثر جایگزیدگی حفره‌ها، کمربندی از عایق را در صفحات CuO_2 به وجود آورند و حفره‌های بیشتری را در مقادیر بالاتر آلایش از سیستم خارج کنند. علاوه بر این، فرضهای پرشدگی، شکست جفت و نابجانشینی Pr از نظر هندسی وابسته به یک یون بوده و در ایجاد خوشه‌های N، ضعیف‌تر از فرض جایگزیدگی عمل می‌کنند، هر چند که اثر جزیرهٔ حفره‌ای صرفاً وابسته به فرض جایگزیدگی حفره‌ای نیست. توجه به این نکته که در این مرحله کم کم خوشه‌های ابررسانا با کمربندی از سلهای N از هم جدا می‌شوند و عملاً نقش خود را در رسانش از دست می‌دهند، تقریب ثابت فرض کردن چگالی حاملها تقریب مناسبی خواهد بود. در واقع با افزایش x به یک نقطهٔ بحرانی می‌رسیم که دیگر خوشه‌ای با ابعاد سیستم وجود ندارد، یعنی در این لحظه گذار به فاز عایق اتفاق می‌افتد. شکل ۵ اثر جایگزیدگی حفره‌ای را نشان می‌دهد که در آلائیدگی کم به خوبی داده‌های تجربی را تبیین می‌کند ولی در مقادیر زیاد جوابگو نیست. شکل ۶ اثر جایگزیدگی حفره و جزیرهٔ حفره‌ای را نشان می‌دهد و مشاهده



شکل ۵. نمودار چگالی حاملها در صفحه CuO_2 . خط نازک نمایش رابطه ساده تخمینی $n_{mh}=0/25-2x^2$ است. خط ضخیم نتیجه شبیه‌سازی کامپیوتری برای Y-۱۲۳ و خط چین سهم خوشه‌های S را به کل سطح است. نقاط توپر نتیجه تجربی برای Y-۱۲۳ [۱۷ و ۱۹] و ضربدر نتیجه تجربی برای Gd-۱۲۳ است [۴].



شکل ۶. نمودار چگالی حاملها در صفحه CuO_2 با لحاظ کردن اثر جزیرهٔ حفره. خط نازک نمایش رابطه سادهٔ تخمینی $n_{mh}=0/25-2x^2$ است. خط ضخیم نتیجه شبیه‌سازی کامپیوتری برای Y-۱۲۳ و Gd- و خط چین سهم خوشهٔ بینهایتی S به کل سطح است. نقاط توپر نتیجه تجربی برای Y-۱۲۳ [۱۷ و ۱۹] و ضربدر نتیجهٔ تجربی برای Gd-۱۲۳ [۴] است. نقطه چین سهم جزیره‌های حفره از کل سطح است.

می‌شود در تمام محدوده تغییرات آلایش رفتار نمونه Gd/Pr-۱۲۳ را تبیین می‌کند.

آنچه مشخصاً در مورد همه Rها [۲۴] دیده می‌شود این است که در چگالی حفره $n_{mh}\sim 0/15$ جایگزیدگی حفره‌ها متوقف می‌شود. این نقطه در ترکیبات مختلف بر حسب مقدار Pr متفاوت خواهد بود، اما در عین حال با نقطه‌ای که تغییر ساختار O-T در آن گزارش شده متناظر است [۳۱]. از طرفی با توجه به این وابستگی چگالی حاملها مشابها می‌توان با تکیه بر تغییر مقدار اکسیژن δ در $RBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ اثر مشابه تغییر ساختار را دید، که در کار قبلی به تفصیل روی آن بحث شده است [۱].

از دیدگاه پرکولاسیون نیز می‌توان این مسئله را بازبینی کرد، با افزایش x مشاهده می‌شود، که بعد خوشه‌های S از ۲ به سمت ۱ میل می‌کند. از آنجا که وابستگی انرژی پتانسیل کولنی در ابعاد پایین به تغییر چگالی شدیدتر است، لذا اثر دافعه کولنی با افزایش Pr افزایش می‌یابد، تا جایی که مانع جایگزیدگی حفره‌ها می‌شود. اما همان طور که گفته شد، در مقابل با کاهش بعد خوشه‌های S در واقع از هم گسیخته می‌شوند و ارتباط مستقیم رسانشی با هم را از دست می‌دهند، از آنجایی که خوشه‌هایی که ابعادی کوچکتر از ابعاد سیستم دارند سهم کل حفره‌ها را کاهش می‌دهند منحنیهای نقطه چین در شکلهای ۵ و ۶ سهم این خوشه‌ها را از کل سطح نشان می‌دهد.

به طور خلاصه، رفتار T_c برحسب آلایش Pr در سیستم Gd/Pr-۱۲۳ با استناد به آزمایشها مکرری که انجام گرفته است خطی نبوده و دارای دو پله (Plato) است. پله اول: در آلایش کم (xهای کم و یا $n_{mh}\geq 0/15$) اثر جایگزیدگی حفره‌ها غالب است زیرا که تراکم سلهای N نسبت به سلهای S بسیار کم است. با افزایش x اثر دافعهٔ کولنی حفره‌های جایگزیده افزایش می‌یابد و به حدی می‌رسد که از اثر جایگزیدگی حفره‌ها در اثر جانشینی بیشتر Pr/R جلوگیری می‌کند. پله دوم: از این مرحله به بعد یعنی در آلایشهای زیاد (xهای بالا و یا $n_{mh}\leq 0/15$) اثرات تجمعی حفره‌ها ظاهر می‌شود و جزیره‌های حفره‌ای شکل می‌گیرد. این جزیره می‌تواند تماماً از سلهای N تشکیل شده باشد و یا اینکه مجموعه‌ای از سلهای S درون کمربندی از سلهای N بدام افتاده باشند که باعث حذف آنها از خوشه‌های S می‌گردند. با نزدیک شدن به x_c رفتار شدید شده و گذار فاز ابررسانا – عایق رخ می‌دهد. در تمامی مراحل بالا اثرات پرشدگی حفره‌ها،

نابجانشینی و غیره با توجه به اینکه نقش اساسی را ایفا نمی‌کنند اما در شدت بخشیدن به رفتار تجمعی حفره‌ها و ایجاد جزیره حفره‌ای خصوصاً در نزدیکی x_c دخالت دارند. شکل ۶ به خوبی دوپله‌ای بودن گذار فاز ابررسانا – عایق در سیستم ۱۲۳ آلاییده با Pr را نشان می‌دهد.

قدردانی

نویسندگان مقاله کمال تشکر را از دکتر اخوان به خاطر راهنماییها و همفکریهای سودمند ایشان دارند. همچنین از معاونت محترم پژوهشی دانشگاه الزهرا (س) به خاطر حمایت مالی تشکر می‌کنند.

مراجع

1. H Khosroabadi, V Daadmehr and M Akhavan, *Modern Phys. Lett*. B **25** (2002) 943.
2. V Daadmehr and M Akhavan, *Phys. Stat. Sol*. (a) **193** (2002) 153.
3. Z Yamani and M Akhavan, *Supercond. Sci. Technol*. **10** (1997) 427.
4. M R Mohammadizadeh and M Akhavan, *Supercond. Sci. Technol*. **16** (2003) 1216.
5. M R Mohammadizadeh and M Akhavan, *Eur. Phys. J*. B **33** (2003) 381.
6. V Daadmehr, E Ziaei and M Akhavan, *Physica* B **321** (2002) 313-316.
7. H Khosroabadi, M R Mohammadizadeh and M Akhavan, *Physics* C **370** (2002) 85.
8. M Akhavan, *Phyaica* B **321** (2002) 265.
9. Y Tokura, J B Torrance, T C Huang and A I Nazzai, *Phys. Rev*. B **38** (1988) 7156.
10. H Shakeripour and M Akavan, *Supercond. Sci. Technol*. **14** (2001) 213.
11. M Muroi and R Street, *Physica* C **301** (1998) 277.
12. M Muroi and R Street, *Physica* C **216** (1993) 345.
13. A Matsuda, K Kinoshita, T Ishii, H Shibata, T Watanabe and T Yamada, *Phys. Rev*. B. **38** (1988) 2910.
14. A P Goncalves, I C Santos, E B Lopes, R T Henruques and A Almeida, *Phys. Rev*. B. **37** (1998) 7476.
15. X X Tang, A Manthirm and J B Goodenough, *Physica* C **161** (1989) 574.
16. Fehrenbacher and T M Rice, *Phys. Rev. Lett*. **79** (1993)2471.
17. A Kebede, C S Jee, J Schwelger, J E Crow, T Mihalision, G H Myer, R E Salomon, P Schlohmann, M V Kuric, S H Bloom and R P Guertin, *Phys. Rev*. B **40** (1989) 4453.
18. J J Neumeier, T Bernholm, M B Maple and I K Schuller, *Phys. Rev. Lett*. **63** (1989) 2516.
19. D Staufferand and A Aharony, "*Introduction to Percolation Theory*", Taylor & Francis, Washington, DC, (1992).
20. J W Greene, A El Gamal, *J. Assoc. Comput. Mach*. **31** (1984) 694.
21. J Hoshen and Kopelman, *Phys. Rev*. B. **14** (1976) 3438.
22. J Hoshen, *Pattern Recognition Lett*. **19** (1998) 575.
23. M Muroi and R Street, *Physica* C **228** (1994) 216.
24. H A Blackstead, J D Dow, D B Chisey, J S Horwitz, M A Black, P J McGinn, A E Klunzinger, and D B Pulling, *Phys. Rev*. B. **54** (1996) 6122.
25. C H Booth, F Bridges, J B Byce, T Claeson, Z X Zhao and P Cervantes, *Phys. Rev*. B. **49** (1994) 3432.
26. K Takenaka, Y Imanaka, K Tamasaku, T Ito and S Uchida, *Phys. Rev*. B. **46** (1992) 5833.
27. J D Jorgensen et al., *Phys. Rev*. B **41** (1990) 1863.
28. H B Radosky, *J Mater. Res*. **7** (1992) 1917.
29. M K Wu, J R Ashburn, C J Torng, P H Hor, L Meng, L Gao, Z J Huang, Y Q Wang and C W Chu, *Phys. Rev. Lett*. **58** (1997) 908.
30. K M Pansuria, D G Kuberkar, G J Baldha and RG Kulkarni, *Supercond. Sci. Technol*. **12** (1999) 579.
31. X J Yunhui, *GCPD e.V. 5 sep*. 1999.
32. V G Harris, D J Fatemi, V M Browning, M S Osofsky and T A Vanderah, *J. Appl. Phys*. **83** (1998) 6783.