

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ

УДК 537.312.62

РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ВІДОБРАЖЕННЯ Й АНАЛІЗУ РЕЗУЛЬТАТІВ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

О. Бабич, Я. Бойко, І. Габрієль, Д. Слотвінський

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна
orestbabych@gmail.com*

Розроблено програмне забезпечення мовою програмування C++ з метою створення інтерфейсу користувача для відображення й аналізу результатів наукових досліджень. Проаналізовано та протестовано роботу програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання температурних залежностей коефіцієнта термо-е.р.с. $S(T)$ високотемпературних надпровідників.

Результати розрахунку дали змогу оцінити ступінь впливу легування високотемпературних надпровідників не тільки на параметри зонного спектра, а й на критичну температуру (T_c) і простежити взаємозв'язок між ними. Виявлено кореляцію між T_c і шириною провідної зони W . Виконано порівняння залежності $T_c(W)$ для високотемпературних надпровідників на основі Tl і Bi з високотемпературними надпровідниками на основі Hg.

Ключові слова: високотемпературна надпровідність, температура надпровідного переходу, коефіцієнт термо-е.р.с., вузька провідна зона, пік густини станів, рівень Фермі.

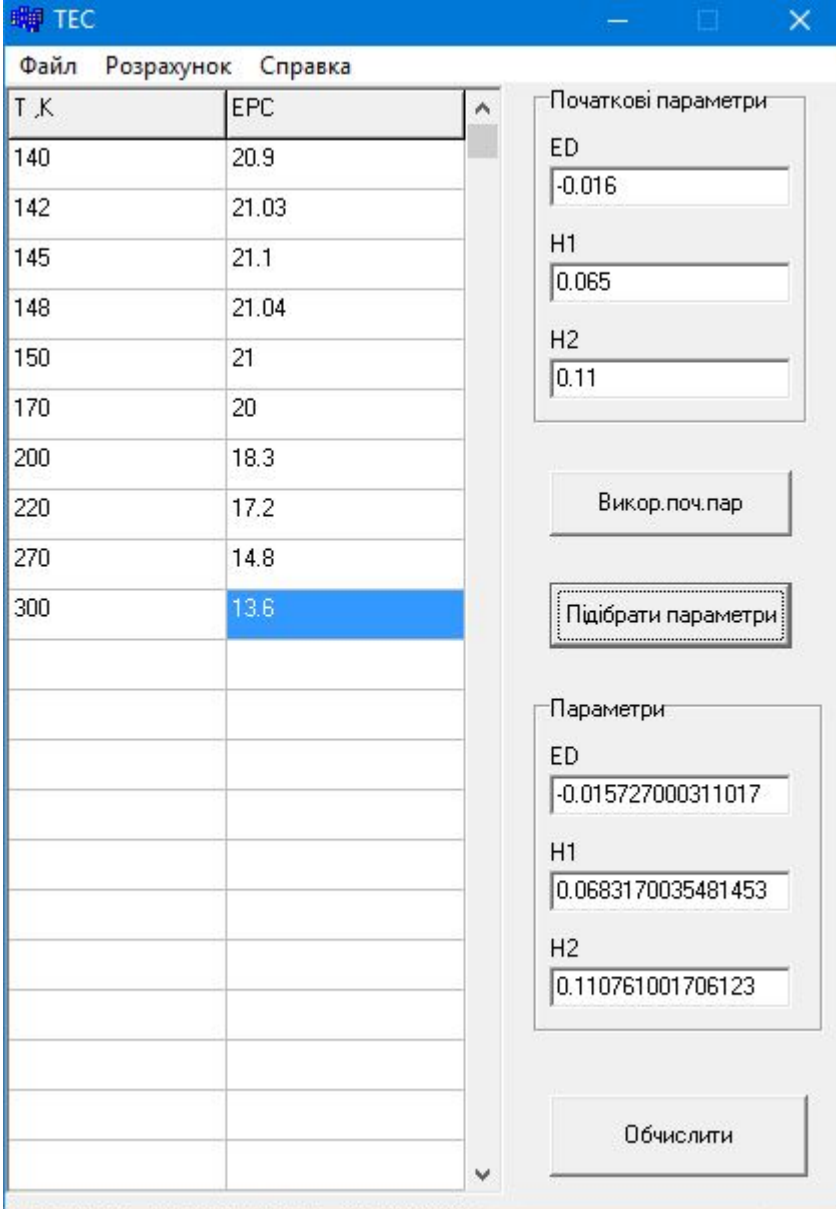
Після запуску програми отримуємо інтерфейс користувача для введення вхідних даних (табл. 1). У першому стовпці для $S(T)$ вводимо температуру T , К, а в другому – значення коефіцієнта термо-е.р.с. S , $\mu\text{В/К}$ (ЕРС).

Також потрібно ввести у відповідні віконця початкові параметри, отримані спочатку наближено в ході узгодження експериментальних і розрахункових залежностей $S(T)$: положення піка густини станів E_D , який відображали у вигляді асиметричного лоренціану з півширинами H_1, H_2 [1].

Потім ці параметри за методом найменших квадратів підбирають точніше (підібрані параметри).

Після підбору параметрів E_D, H_1, H_2 натискаємо на кнопку **Обчислити**. З'явиться вікно, у якому відобразатимуться вихідні дані: результат розрахунку залежностей коефіцієнта термо-е.р.с. ЕРС, ступеня заповнення провідної зони електронами, а також енергетична залежність піка густини станів $G(E)$, максимальне значення густини станів $G(E_d)$ і значення густини станів на рівні Фермі $G(E_F)$ (табл. 2).

Уведення вхідних даних



The screenshot shows the 'TEC' software interface. On the left is a table with two columns: 'T, К' and 'EPC'. The row with 'T, К' = 300 and 'EPC' = 13.6 is highlighted in blue. On the right, there are three sections for parameter input:

- Початкові параметри (Initial parameters):**
 - ED: -0.016
 - H1: 0.065
 - H2: 0.11
- Викор. поч. пар (Use initial parameters):** A button.
- Підібрати параметри (Select parameters):** A button.
- Параметри (Parameters):**
 - ED: -0.015727000311017
 - H1: 0.0683170035481453
 - H2: 0.110761001706123
- Обчислити (Calculate):** A button.

Таблиця 2

Результати обчислення – вихідні дані

T, K	ERC	Заповнення	E	G
140	21.1904178846906	0.474933445300007	-0.5	0.0744871481698306
142	21.1208116214596	0.474866071037185	-0.49998	0.0744932623088004
145	21.0108972616562	0.474676382243663	-0.49996	0.0744993771990127
148	20.8949168025899	0.474488408907538	-0.49994	0.0745054928405903
150	20.8145089933969	0.474364081390305	-0.49992	0.074511609233656
170	19.9075432735847	0.473168086347395	-0.4999	0.0745177263783328
200	18.3660614869117	0.471551233855136	-0.49988	0.0745238442747435
220	17.3159864587213	0.470596407604351	-0.49986	0.074529962923011
270	14.8398600400342	0.468620624415731	-0.49984	0.0745360823232583
300	13.514571224824	0.467689322011792	-0.49982	0.0745422024756083
			-0.4998	0.074548323380184
			-0.49978	0.0745544450371085
			-0.49976	0.0745605674465048
			-0.49974	0.0745666906084959
			-0.49972	0.074572814523205
			-0.4997	0.0745789391907552
			-0.49968	0.0745850646112695
			-0.49966	0.0745911907848712
			-0.49964	0.0745973177116835
			-0.49962	0.0746034453918296
			-0.4996	0.0746095738254327

Графік $f=S(T)$	Графік $f=G(E)$	G(E _d)	G(E _f)
		11.833046419014	11.1282025358125

Натиснувши на кнопку Графік $f = S(T)$, отримуємо експериментальні та розрахункові графіки залежності коефіцієнта термо-е.р.с від температури (рис. 1).

Відповідно, натиснувши на кнопку Графік $f = G(E)$, отримуємо графіки залежності піка густини станів у ділянці рівня Фермі від енергії (рис. 2).

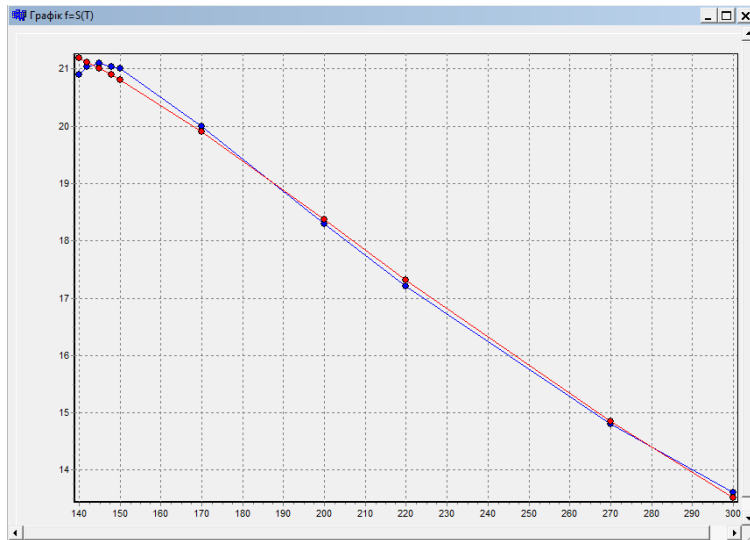


Рис. 1. Графік залежності коефіцієнта термо-е.р.с. від температури.

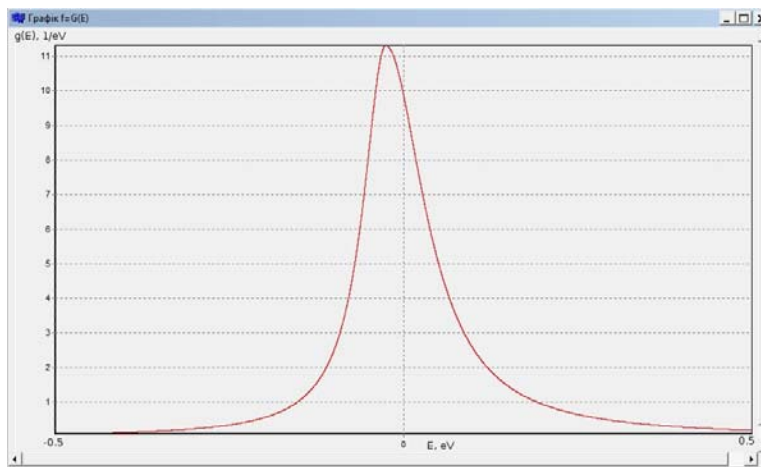


Рис. 2. Графік залежності піка густини станів у ділянці рівня Фермі від енергії.

Проаналізовано результати наукових досліджень, отримані з використанням розробленого програмного забезпечення. З літературних джерел відомо, що на температурних залежностях коефіцієнта термо-е.р.с. високотемпературних надпровідників (ВТНП) на основі Hg, Tl, Bi та інших простежується виражений максимум за температури вище від температури надпровідного переходу T_c , а також менш або більш протяжна ділянка практично лінійного спадання $S(T)$ з підвищенням температури аж до $T = 300$ K [1–5].

Абсолютні значення коефіцієнта термо-е.р.с. у разі катіонних заміщень (зростання концентрації домішок у твердих розчинах) і аніонного легування (зростання кисневого індексу δ) послідовно збільшуються, а максимум зміщується в ділянку вищих температур. На рис. 3 показано експериментальні та розрахункові залежності коефіцієнта термо-е.р.с. для першого члена ртутного гомологічного ряду $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$.

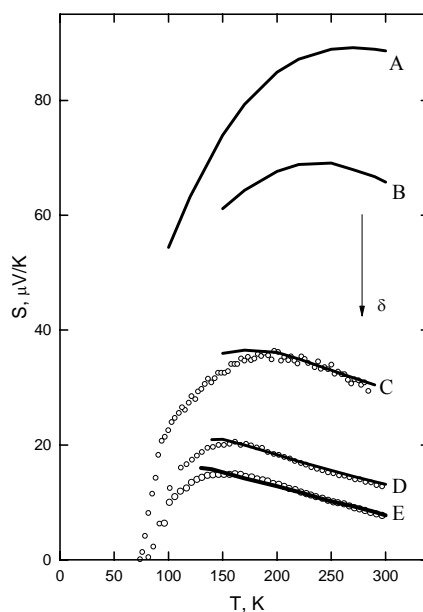


Рис. 3. Експериментальні [1] та розрахункові (суцільні лінії) температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с. відпалених $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ за різних умов (табл. 3).

Літературні дані та розрахункові параметри зонного спектра для першого члена ртутного гомологічного ряду $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ наведені в табл. 3.

Таблиця 3

Дані з [1] для $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ і розрахункові параметри зонного спектра

Marking	T_C , K	Oxygen content	E_0 , meV	W , meV	W_1/W_2	F , при 300K	$D(E_F)$, eV
A	36	4,032	-75,00	108	0,42	0,600	6,26
B	48	4,033	-53,60	105	0,495	0,561	7,37
C	72	4,043	-29,00	98	0,52	0,476	10,01
D	82	4,052	-15,70	89,5	0,61	0,468	11,13
E	89	4,058	-11,40	82,0	0,65	0,457	12,25

Як засвідчують результати розрахунків (див. рис. 3, табл. 3), зростання вмісту кисню в чистих і легуваних Hg-зразках (у випадку переходу до оптимального стану) призводить до зменшення ступеня заповнення зони електронами F . У цьому разі рівень Фермі зміщується з ділянки меншого значення і різкішої залежності густини станів $D(E)$

ближче до середини зони (великі значення і менш різка залежність $D(E)$), а ширина W і асиметрія (W_1/W_2) вузької провідної зони зменшуються. Такий рух E_F можна пов'язати з акцепторним ефектом кисню – здатністю захоплювати електрони.

Аналогічний характер поведінки зонних параметрів спостерігається в Hg-, Tl-, Bi-зразках при зміні рівня легування домішкою. В даному випадку, при його зростанні (відхід від оптимального стану), збільшення ступеня заповнення зони електронами в цілому можна пояснити більшою валентністю заміщуючого елементу в порівнянні з заміщуваним. При цьому залежність $F(x)$ є нелінійною.

Отримані залежності відповідають моделі Андерсона: зі збільшенням вмісту кисню і зменшенням концентрації домішки ступінь упорядкування в системі зростає; унаслідок звуження зони і спадання локалізованих станів на її краях значення функції густини станів на рівні Фермі набувають великих значень і надпровідні властивості поліпшуються.

Результати розрахунку дали змогу оцінити ступінь впливу легування ВТНП не тільки на параметри зонного спектра, а й на критичну температуру і простежити взаємозв'язок між ними. Виявлено кореляцію між T_c і шириною провідної зони W . Причиною зменшення T_c зі зростанням W може бути збільшення густини станів на рівні Фермі внаслідок розширення провідної зони.

Залежності температури надпровідного переходу від ширини забороненої зони для всіх досліджуваних надпровідників має квазілінійний характер. Порівняння залежності $T_c(W)$ для Tl-, Bi-ВТНП з Hg-ВТНП довело ідентичність їхньої поведінки – криві накладаються одна на одну. Це свідчить про аналогічні механізми виникнення надпровідного стану для цих ВТНП.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Yamamoto A. Effects of Zn substitution on the superconductivity and pseudogap in $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ with various doping level / A. Yamamoto, K. Minami, W.-Z. Hu [et al.] // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 104505.
2. Ren Y. T. Thermopower and resistivity measurements on oxygen-annealed $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ / Y. T. Ren, J. Clayhold, Z. J. Chen [et al.] // Physica C. – 1993. – Vol. 217, N 6. – P. 6–10.
3. Subramaniam C. K. Thermoelectric power and resistivity measurements on oxygen-annealed $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ superconductors / C. K. Subramaniam, M. Paranthaman, A. B. Kaiser // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 51. – P. 1330.
4. Poddar A. Effect of Co-substitution on superconductivity and transport in $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Cu}_{1-y}\text{Co}_y)_2\text{O}_{8+\delta}$ / A. Poddar, B. Bandyopadhyay, B. Chattopadhyay // Physica C: Superconductivity. – 2003. – Vol. 390. – P. 120–126.
5. Mandrus D. Two-dimensional electron localization in bulk single crystals of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Y}_x\text{Ca}_{1-x}\text{Cu}_2\text{O}_8$ / D. Mandrus, L. Forro, C. Kendziora, L. Mihaly // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 44, N 1. – P. 2418–2421.

Стаття: надійшла до редакції 10.08.2017,
доопрацьована 17.08.2017,
прийнята до друку 19.08.2017.

DEVELOPMENT OF SOFTWARE FOR REPRESENTATION AND ANALYSIS OF SCIENTIFIC RESEARCH RESULTS

O. Babych, Ya. Boyko, I. Gabriel, D. Slotvinsky

*Ivan Franko National University of Lviv,
50 Drahomanov St., UA-79005 Lviv, Ukraine
orestbabych@gmail.com*

The software in C ++ programming language for creation of user interface and presentation and analysis of scientific research results was developed. The work of the software for the computer simulation of the temperature dependences of the coefficient and thermoelectric power $S(T)$ of high-temperature superconductors (HTSC) has been analyzed and tested. The results of calculations made it possible to estimate the degree of influence of doping HTSC not only on the parameters of the band spectrum, but also on the critical temperature (T_c) and to follow the relationship between them. The obtained dependences are in accordance with the Anderson model: with the increase in the content of oxygen and the reduction of the concentration of impurities, the degree of ordering in the system increases. As a result of the narrowing of the band and the decline of localized states at its edges, the value of the function of the density of states at the Fermi level acquires large values and improves the superconducting properties. The correlation between T_c and the width of the conducting band W was found. The comparison of the $T_c(W)$ dependence for Tl- and Bi-HTSC with Hg-HTSC was performed.

Key words: thermoelectric power, high-temperature superconductivity, superconductive transition temperature, Fermi level, narrow conduction band, density of states peak.