

В. И. Алтухов, Б. А. Казаров, П. В. Алтухова (Пятигорск, ПГТУ). Модели особенностей кривой теплопроводности $K(T)$ и гигантского теплосопrotивления W с учетом фазовых переходов, дефектов и нанокластеров в сегнетоэлектриках и кристаллах A_2B_6 .

Тепловые и электрические свойства сегнетоэлектрических кристаллов и полупроводников типа A_2B_6 при низких температурах отличаются высокой чувствительностью к наличию в их кристаллической решетке структурных фазовых переходов, дефектов, примесей или их комплексов (кластеров, доменов и наноструктур). В последнее время появились новые интересные данные по аномальному поведению кривой $K(T)$ для ряда сегнетоэлектрических кристаллов (KDP, ТГС; эластических Hg_2Cl_2). В легированных кристаллах селенида цинка ($ZnSe: Ni$, $ZnSe: Fe$) обнаружено гигантское возрастание (на два порядка и более, чем в 200 раз) теплосопrotивления ($W = K^{-1}$) (см. [1], [2]).

В докладе представлены результаты математического моделирования механизмов рассеяния фононов и тепловых свойств материалов твердотельной микроэлектроники. Рассмотрены: модели флуктуационного эффекта биений (KDP, Hg_2Cl_2), модель гигантского теплосопrotивления ($A_2B_6 : ZnSe, ZnS$), аномалии на кривой $K(T)$ около $T = T_C$ (ТГС). Для коэффициента теплопроводности гармонического кубического кристалла с примесями или дефектами (нанокластерами, коллоидами) была получена формула типа Кубо–Гринвуда [2]:

$$K(T) = \frac{1}{6\pi k_B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 \omega^2}{T^2 V} n(\omega) [n(\omega) + 1] \text{Sp} |\Pi(\omega)|^2 d\omega, \quad (1)$$

$$\Pi^p(\Pi'_i \omega) = \sum_{l''} Q^p(l'') \text{Im} D(l'' l'_i \omega). \quad (1a)$$

Здесь V — объем кристалла, Q определяется массами и силовыми постоянными атомов в узле l кристаллической решетки, $D(\omega)$ — функция Грина реального кристалла. С учетом наличия в системе фазового перехода получено уравнение Бете–Солпитера для корреляционной функции ток–ток и определены критические индексы поведения системы при $T \rightarrow T_C$.

В τ -приближении, после конфигурационного усреднения по примесям формула (1) использовалась для расчета зависимости $K(T)$ в простой дебаевской модели спектра фононов кристалла с фазовым переходом, дефектами и наночастицами. При этом было определено полное сечение рассеяния фононов $\gamma(x) = \gamma_0 + \gamma_C + \gamma_k + \gamma_r$, где γ_0 отвечает за рассеяние фононов в исходном («идеальном») кристалле, γ_C — за счет механизмов структурного фазового перехода, γ_k — дефектов и их комплексов (наночастиц) и γ_r — за счет резонансного рассеяния фононов на примесях [1], [2].

Таким образом, предложено модельное описание поведения кривой теплопроводности $K(T)$ на микроскопическом уровне и определены механизмы рассеяния фононов на точечных дефектах, их комплексах, кластерах-наночастицах и при $T \rightarrow T_C$. Полученная формула типа Кубо–Гринвуда позволяет рассчитывать особенности решеточной теплопроводности сегнетоэлектрических (эластических) кристаллов около T_C и гигантское теплосопrotивление полупроводников типа A_2B_6 .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алтухов В. И., Ростова А. Т., Казаров Б. А. Рассеяние фононов на точечных дефектах структуры, комплексах-наночастицах. — НМСТ, 2006, № 3, с. 19, № 4, с. 11.
2. Алтухов В. И., Казаров Б. А., Баландина Н. В., Тимченко О. В. Модели особенностей теплового сопротивления кристаллов. — Изв. Самарского НЦ РАН 2007, т. 9, № 3, с. 640.