

УДК 548.536.537226.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ШИРОКОЗОННЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ МЕТОДОВ ДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ГРИНА И ФОРМУЛ ТИПА КУБО – ГРИНВУДА

¹Казаров Б.А., ²Митюгова О.А., ²Алтухов В.И.

¹Кавминводский институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Южно-Российский государственный
политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова», Георгиевск,

e-mail: kazarovbeniamin@mail.ru;

²Институт сервиса, туризма и дизайна (филиал)

ФГАОУ ВПО «Северо-Кавказский федеральный университет», Пятигорск

В работе анализируются подходы и методы описания наноструктурированных систем широкозонных материалов (A^2B^6 , TGS, SiC, нитриды (GaN), SiC-AlN, SiC-BeO и гетероструктуры на их основе). Рассмотрены возможности метода динамических функций Грина (МДФГ), формул типа Кубо – Гринвуда применительно к локализации носителей Андерсона, фазовым переходам Мотта, к размерным и мезоскопическим эффектам: гигантское тепловое сопротивление (A^2B^6), гигантское усиление диэлектрической проницаемости (SiC-AlN), флуктуационный эффект биений – интерференция различных механизмов (каналов) рассеяния фононов (TGS), немонотонная зависимость проводимости от состава x (SiC-AlN, SiC-BeO) и др. На основе формул Кубо – Гринвуда в работе продемонстрированы результаты моделирования (описания) свойств широкозонных наноструктурированных материалов, их твердых растворов с нанокластерами и дефектами (TGS). Показано, что наноструктурированные материалы чувствительны к симметрии структуры (политипы – более 200 видов в SiC), к микроскопическому строению дефектов структуры и нанокластеров (A^2B^6 , TGS); они обладают свойствами, сильно зависящими от размерностей системы; анизотропией процессов, протекающих в слоях, гетероструктурах, пленках.

Ключевые слова: широкозонные материалы, твердые растворы, гетероструктуры, пленки, функции Грина, теплопроводность, электропроводность, диэлектрическая проницаемость, мезоскопические эффекты

MODELING THE PROPERTIES OF WIDE BANDGAP NANOSTRUCTURED MATERIALS WITHIN METHODS OF DYNAMIC GREEN'S FUNCTIONS AND FORMULAS OF TYPE KUBO-GREENWOOD

¹Kazarov B.A., ²Mityugova O.A., ²Altukhov V.I.

¹Kavminvodsky Institute (branch) «South-Russian State Technical University (NPI)
of M.I. Platov», Georgiyevsk, e-mail: kazarovbeniamin@mail.ru;

²Institute of service, tourism and design (branch) «North Caucasus Federal University», Pyatigorsk

The paper analyzes the approaches and methods to describe nanostructured materials wideband systems (A^2B^6 , TGS, SiC, nitrides (GaN), SiC-AlN, SiC-BeO and heterostructures based on them). The possibilities of the method of dynamic Green's functions (MDFG), formulas such as Kubo-Greenwood in relation to carrier localization Anderson, Mott phase transitions, and to dimensional mesoscopic effects: a giant thermal resistance (A^2B^6), giant amplification of the dielectric constant (SiC-AlN), the fluctuation effect beats – a combination of different mechanisms (channels) phonon scattering (TGS), a non-monotonic dependence of the conductivity on the composition x (SiC-AlN, SiC-BeO), and others. On the basis of formulas Kubo-Greenwood in the simulation results demonstrated (description) properties of nanostructured materials wideband and their solid solutions with nanoclusters and defects (TGS). It is shown that nanostructured materials are sensitive to symmetry structure (polytypes -more than 200 species in SiC), to the microscopic structure of structural defects and nanoclusters (A^2B^6 , TGS); they have properties that are heavily dependent on the dimensions of the system; anisotropy of the processes occurring in the layers, heterostructures films.

Keywords: wide-materials, solid solutions, heterostructures, film, Green's function, thermal conductivity, electrical conductivity, permittivity, and mesoscopic effects

На современном этапе развития теории кинетических явлений и других свойств наноструктурированных материалов можно выделить две тенденции. С одной стороны, резко усиливается интерес к так называемым экзотическим ситуациям, мезоскопическим и размерным системам [3,4], в которых кинетическое уравнение частично или полностью неприменимо и требуется

существенный квантовый подход с позиций мезонанофизики. В частности, неослабевающий интерес вызывает системы низкой размерности с различными типами локализации носителей (гетероструктуры SiC и слои), несоразмерные системы (сегнетоэлектрики), широкозонные полупроводники (A^2B^6 , SiC, SiC-AlN) [1, 2, 5], гетероструктуры, слои, пленки для силовой

электроники [5–8]. Во многих случаях описание таких систем связано с фундаментальными трудностями, вследствие чего часто отсутствует не только количественная, но даже качественная картина явлений. С другой стороны, по-прежнему актуальной остается задача количественного описания кинетических и других свойств в реальных широкозонных кристаллах, материалах и твердых растворах, в том числе на основе карбида кремния. Использование здесь преимуществ метода динамических функций Грина и компьютерного моделирования позволяет надеяться на успешное решение задачи на микрокопическом уровне.

Указанные выше два подхода в развитии современной теории кинетических и других свойств кристаллов определили содержание настоящей работы. Очевидно, что, находясь на «стыке» таких важных областей, как физика фазовых переходов и мезофизика, изучение явлений фононного и электронного переноса в реальных широкозонных кристаллах с нанокластерами, дефектами и (или) фазовыми переходами оказывается крайне востребованным.

Решение возникающих здесь вопросов требует более эффективного подхода, позволяющего учесть роль микрокопических деталей структуры, уменьшить число используемых малых параметров системы, отказать от использования или расширить область применимости кинетического уравнения. В качестве такого подхода наиболее эффективным и универсальным является метод динамических функций Грина (МДФГ) и Кубо – Гринвуда [1, 2]. В частности, МДФГ дает возможность получить точные для гармонической модели кристалла, замкнутые выражения типа Кубо – Гринвуда, связывавшие коэффициенты теплопроводности и проводимости с динамическими функциями Грина системы. Тем самым вычисление неравновесных свойств кристаллов и твердых растворов сводится к задаче определения параметров системы в состоянии статистического равновесия и открывается возможность широкого использования методов функций Грина и, как следствие, количественного анализа свойств систем на микрокопическом уровне.

Ранее метод МДФГ не был приспособлен даже для случая изменения сил связи на примесном атоме. Он не был разработан и для более общих ситуаций, когда важны эффекты биений, многочастичные корреляции, флуктуации параметра порядка, гигантское усиление или подавление кинетических характеристик мезосистем. Подчеркнем, что развитие МДФГ в указанных направлениях делает его эф-

фективным средством исследования широкого круга проблем, в том числе количественного анализа особенностей свойств в наноструктурированных широкозонных материалах и в частности на основе карбида кремния [3, 4].

1. Элементы теории линейной реакции квантовомеханической системы на внешнее возмущение (формулы Кубо)

Остановимся здесь коротко на общем квантовом подходе описания систем в термодинамике неравновесных процессов.

1.1. Двухвременные функции Грина квантовых систем. Применение формул типа Кубо – Гринвуда. Как было показано выше, наиболее эффективным и наглядным способом исследования кинетических свойств широкозонных полупроводников на микрокопическом уровне в настоящее время является метод динамических двухвременных функций Грина (ФГ), компоненты Фурье которых по определению имеют вид [3, 4]

$$G_{AB}(\omega) = \omega \langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega} = \langle [A, B]_{\eta} \rangle - \langle \langle A | [B, H] \rangle \rangle_{\omega}. \quad (1)$$

Двухвременные функции Грина (1), являясь удобным обобщением временных корреляционных функций, естественным образом возникают при рассмотрении реакции термодинамической системы на внешнее возмущение. Ввиду важности для конкретных задач формул типа Кубо – Гринвуда и МДФГ остановимся кратко, но с необходимыми ссылками на соответствующую литературу на методике их получения в квантовой теории линейной реакции системы на внешнее возмущение.

1.2. Проводимость широкозонных полупроводников и мезокопических систем. В частном случае, когда к системе приложено внешнее электрическое поле $E(t)$, возмущение имеет вид [1, 3]

$$H'_i = -PE(t);$$

$$P = \sum_s r_s e_s,$$

где r_s – радиус-вектор s – частицы с зарядом e_s . Если оператор тока $I = A$, то для среднего тока $\bar{I}(t)$ в электрическом поле $E(t)$ получаем

$$\bar{I}_{\alpha}(t) = -\sum_{\beta} \int_0^t dt' \int_0^{\beta} d\lambda < I_{\alpha} \rangle; \quad (2)$$

$$\dot{P}_{\beta}(t' - i\lambda) > E_{\beta}(t').$$

Поскольку производная от поляризации $\dot{P} = (d/dt)P = I$, то для проводимости системы, в частном случае стационарного возмущения, находим

$$\sigma_{\alpha\beta}(T) = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} dt \int_0^{\beta} \langle I_{\alpha}(-i\hbar\lambda) I_{\beta}(t) \rangle d\lambda. \quad (3)$$

Здесь адиабатическое включение предполагает предел при $\varepsilon \rightarrow 0^+$, $\beta = 1/k_B T$, k_B – постоянная Больцмана.

В частности, для широкозонных полупроводников и мезоскопических систем с относительно малой подвижностью носителей с учетом конкретного гамильтониана, для проводимости $\sigma(T)$ согласно формуле Кубо – Гринвуда (3) получаем интеграл по энергиям ε с плотностью состояний $g(\varepsilon)$ [2,3]:

$$\sigma_{\alpha\beta}^i(T) = 2e^2 \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_i}{\partial \varepsilon} \right) v_{\alpha}^i(\varepsilon) \times v_{\beta}^i(\varepsilon) \tau_{\alpha\beta}^i(\varepsilon, q_i^F) g_i(\varepsilon) d\varepsilon; \quad (4)$$

$$\hbar v_{\alpha}^i(\varepsilon) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\alpha}^i};$$

$$f_i(x) = [\exp(x - j_i) - 1]^{-1}, \quad (4')$$

где $x = \frac{\varepsilon}{k_B T}$; $j_i = j - \Delta x_i$; $\Delta x_i = \frac{\Delta \varepsilon_i}{k_B T}$; $j = \frac{\zeta}{k_B T}$;

$q_i^F = \frac{k_i^F}{\sqrt{M_{ai}}}$; ζ и k_i^F – химический потенциал и импульс Ферми, $g_i(\varepsilon)$ и M_{ai} – плотность состояний и эффективная масса плотности состояний в i -й долине спектра; $\Delta \varepsilon_i$ – сдвиг дна зоны проводимости, обусловленный в данном случае спонтанной деформацией и поляризацией; k_B – коэффициент Больцмана; $f_i(x)$ – известная функция Ферми. Формулы (4) и (4') будут использованы ниже при анализе (расчетах) особенностей поведения

проводимости SiC и твердых растворов на его основе.

1.3. Диффузия систем с дефектами и нанокластерами. В случае наличия в системе градиента плотности или концентрации компоненты $\nabla_z c_i$ в направлении z , диффузный поток $I_{zi} = -D_i \nabla_z c_i$ обусловлен возмущением [1]:

$$H_i = -\sum_{l_s} z_{ls} F_i;$$

$$F_i = \xi_i v,$$

где сила F_i связана со средней скоростью v , а коэффициент трения ξ_i согласно соотношению Эйнштейна связан с коэффициентом диффузии:

$$D_i = \frac{k_B T}{\xi_i}.$$

В итоге, определяя среднюю скорость переноса массы вещества, для коэффициента диффузии D_i получаем

$$D_i(T) = k_B T \int_0^{\infty} d\tau \int_0^{\beta} d\lambda \langle I_z(-i\hbar\lambda) I_z(\tau) \rangle, \quad (5)$$

где k_B – постоянная Больцмана и $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

1.4. Теплопроводность систем с дефектами и нанокластерами. При термическом возмущении, обусловленном наличием отклонений от температуры $\nabla_{\alpha} T$, в системе возникает поток тепла Q_{α} за счет движущей «внешней» силы $X_{\alpha} = \nabla_{\alpha} \beta$. Согласно теории линейной реакции для коэффициента теплопроводности $k_{\alpha\beta} = L_{\alpha\beta}$ в данном случае получаем [1–3]

$$k_{\alpha\beta}(T) = \frac{1}{V\beta} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t} dt \int_0^{\beta} d\lambda \langle Q_{\alpha}(0) Q_{\beta}(t + i\lambda) \rangle. \quad (6)$$

В [1, 2] показано, что для гармонического кубического кристалла с дефектами (примесями, нанокластерами) справедливо точное соотношение (обозначения см. в [1, 2]):

$$k_{\alpha\beta}(T) = \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \lambda(T) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{6\pi V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 \omega^2}{k_B T^2} n(\omega) [n(\omega) + 1] Sp |\Pi(\omega)|^2 d\omega, \quad (7)$$

где

$$\Pi^p(ee'_i\omega) = \sum_{e''} Q^p(ee'') \text{Im} G(e''e'_i\omega);$$

$$\text{Im} G(ee'_i\omega) = \pi \sum_j \psi(e_i j) \psi^*(e'_j) \delta(\omega_j^2 - \omega^2). \quad (7')$$

Формулы (7), (7') использованы ниже при анализе поведения гигантского теплового сопротивления в A^2B^6 с дефектами и Ян-теллеровским фазовым переходом при $T_c = 14,5^\circ K$ [5, 11].

1.5. Диэлектрическая восприимчивость широкозонных полупроводников, керамики и мезоскопических систем. Однофононная функция Грина, описывающая реакцию мезоскопической системы на действие внешнего зависящего от времени поля, определяет и ее динамическую восприимчивость. При этом часто можно использовать приближение, когда в массовом операторе $M_{\lambda\lambda}$, не учитывается изменение поляризации и $\lambda = \lambda'$. В этом случае ФГ диагональна по индексу λ и определяет динамическую восприимчивость системы $\chi_\lambda(q, \omega)$ при воздействии внешнего поля с частотой ω и волновым вектором q :

$$\chi_\lambda(q, \omega) = -D_{\lambda\lambda}(q, \omega) = [\omega_{\lambda q}^2 + M_\lambda(q, \omega) - \omega^2]^{-1}. \quad (8)$$

Спектральная плотность возбуждений для ветви λ и волнового вектора q связана с мнимой частью восприимчивости ($\varepsilon = 1 + \chi$ – проницаемость):

$$\chi''(q, \omega) = -\text{Im} D_{\lambda\lambda}(q, \omega + i\delta) = \frac{\pi \rho_\lambda}{\omega^2} = \frac{\omega \Gamma_\lambda(q, \omega)}{[\omega_{\lambda q}^2 - \Delta_{\lambda q}^2(\omega) - \omega^2]^2 + \omega^2 \Gamma_\lambda^2(q, \omega)}. \quad (9)$$

Здесь вещественная и мнимая части массового оператора

$$\Delta_\lambda^2(q, \omega) = -\text{Re} M_\lambda(q, \omega); \quad \Gamma_\lambda(q, \omega) = -\text{Im} M_\lambda(q, \omega + i\delta) \quad (10)$$

определяют перенормировку частоты и затухания возбуждений решётки соответственно.

2. Модели и расчеты кинетических явлений и характеристик широкозонных полупроводников и наноструктурированных материалов: эффекты мезоскопиики

Ниже приведены результаты применения методов динамических функций Грина и формул типа Кубо – Гривуда к анализу поведения и моделированию свойств ряда конкретных полупроводниковых наноструктурированных материалов.

2.1. Модели температурной и концентрационной зависимостей электрической проводимости твердых растворов и проницаемости $\varepsilon(\omega)$ керамики на основе SiC (локализация, переход Мотта, гигантское усиление $\varepsilon(\omega)$)

Учитывая (4), (4'), по аналогии с формулой для теплопроводности получаем [3]

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{m} \langle |D_\varepsilon|^2 \rangle > N(\varepsilon), \quad (11)$$

где $N(\varepsilon)$ и D_ε – соответственно, плотность состояний и матричный элемент волнового вектора ($\hbar k = mv$); $\langle \dots \rangle$ – усреднение по всем состояниям с волновыми функциями $\Psi_p, \Psi_{p'}$, соответствующими энергии перехода ε .

При достаточно низких температурах, согласно (4), (11), в системе с большим количеством примесей типа SiC может иметь место андерсоновская локализация и проводимость будет изменяться по правилу [3]:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{2k_B T}\right). \quad (11')$$

При еще более низких температурах может наблюдаться переход Мотта и для $\sigma(T)$ имеет место закон [3]

$$\ln\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) \approx \left(\frac{\varepsilon_a}{T}\right)^{1/4}. \quad (12)$$

По данным экспериментов [9, 10] в работе были построены логарифмические немонотонные зависимости проводимости ($\ln \sigma$) от концентрации (состава) x при различных значениях температуры ($10^4/T$) для твердых растворов карбида кремния $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ и $(SiC)_{1-x}(BeO)_x$.

В случае андерсоновской локализации согласно (11') [2] на кривой $\ln(\sigma_x)T = \frac{C_0 + C(x-x_0)^\beta}{k_B T}$ как функции состава x при $x \rightarrow x_0$ может наблюдаться точка перегиба при $x = x_0$ ($y_1 \approx -\frac{17}{3} + \frac{160}{3}(x-x_0)^3$,

рис. 1 (кривая 2)). При этом для показателя степени β ранее были получены разные значения (1,5; 1,8; 2,0). Если функцию $\ln \sigma_x(T) = y$ представить в виде ряда по степеням $a_n x^n$, то при $n = 3$ и незначительных изменениях коэффициентов a_n ($y_2 = 1 - 40x + 90x^2 - 60x^3$) получается зависимость $y(x)$ с минимумом слева и максимумом справа от точки $x = x_0$ соответственно (рис. 1 (кривая 4)). Такого типа особенности в $\sigma_x(T)$ могут наблюдаться в некоторых твердых растворах $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ при $x = x_0$.

Полученные в ходе исследования данные в соответствующих областях подвергались обработке методом наименьших квадратов (рис. 1 (кривая 3)). Аналогичные зависимости также наблюдаются в твердых растворах SiC-BeO при $x = x_0$ (рис. 2).

На рис. 1 $y_1 = \frac{-17}{3} - \frac{160}{3} \cdot (x_1 - x_0)^3$; 3 – кривая, построенная методом наименьших квадратов по экспериментальным данным (кривая 1); 4 – кривая $y_2 = 1 - 40x_1 + 90x_1^2 - 60x_1^3$. На рис. 2 $y_1 = -2 - 648 \cdot 10^3 \cdot \left(x_1 - \frac{1}{60}\right)^3$; 3 – кривая, построенная методом наименьших квадратов по экспериментальным данным (кривая 1); 4 – кривая $y_2 = 1 - 870x_1 + 622x_1^2 - 124 \cdot 10^4 \cdot x_1^3$.

Таким образом, в работе построена модель для расчета немонотонной температурной зависимости электропроводности в твердых растворах карбида кремния

$(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$, $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$ при различных концентрациях на основе формулы Кубо – Гринвуда. Построены логарифмические зависимости проводимости ($\ln(\sigma)$) от концентрации x при различных значениях температуры ($10^4/T$) для твердых растворов карбида кремния $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$, которые согласуются с данными соответствующих экспериментов. Рассмотрены переход Мотта и андерсоновская локализация в твердых растворах карбида кремния $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ и $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$. Построены концентрационные немонотонные зависимости проводимости $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$, $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$ при $x = x_0$ с использованием метода наименьших квадратов.

2.2. Гигантское тепловое сопротивление широкозонных полупроводников A^2B^6 . В случае кубического кристалла выражение (7) несколько упрощается, а функции Грина $D(\omega)$ в случае хаотически распределенных примесей можно по методу T-матрицы рассеяния вычислить аналитически. Тогда

$$K(T) = \frac{1}{6\pi k_B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 \omega^2}{T^2 \Omega} n(\omega) [n(\omega) + 1] S p |\Pi(\omega)|^2 d\omega. \quad (13)$$

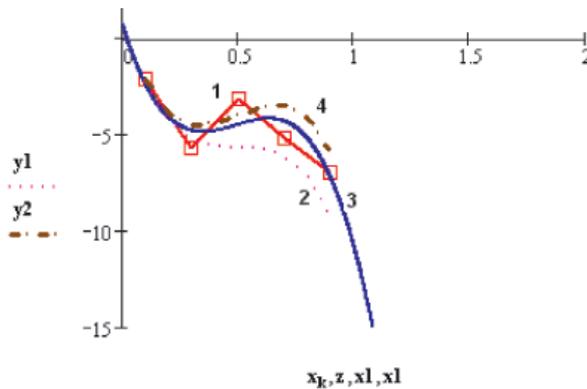


Рис. 1. Зависимость проводимости $\sigma_x(T)$ твердых растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ от x : 1 – экспериментальная кривая [9, 10]; 2 – расчет

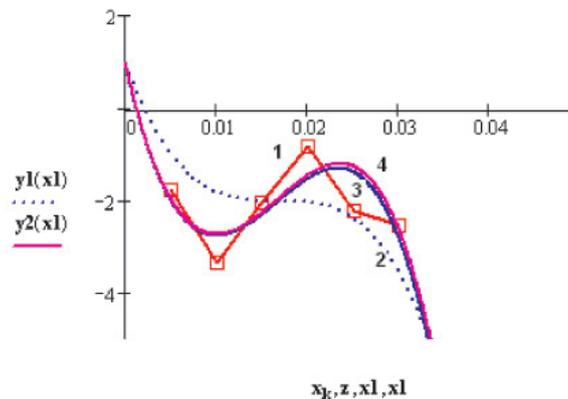


Рис. 2. Зависимость проводимости $\sigma_x(T)$ твердых растворов SiC-BeO от x : 1 – экспериментальная кривая [9, 10]; 2 – расчет

Эта формула связывает решеточную теплопроводность $K(T)$ с динамической функцией Грина реального кристалла $D_{ik}(\omega)$ и справедлива для любой фиксированной конфигурации примесей, она не зависит и от конкретной микроскопической модели дефекта.

При этом в дебаевской модели кристалла с плотностью квадратов частот $\rho(\omega^2) = \frac{3\omega}{\omega_d^2}$, но со временем релаксации $\tau(\omega)$, учитывающим микроскопическое строение дефектов, примесей и нанокластеров, теплопроводности широкозонных полупроводников $K(T)$ согласно (3), (7), (7') можно представить в виде [1–3]

$$K(T) = \frac{1}{2\pi^2 v} \int_0^{\omega_d} \hbar \omega^3 \tau(\omega) \cdot \frac{\frac{\hbar \omega}{k_b T} e^{\frac{\hbar \omega}{k_b T}}}{\left(e^{\frac{\hbar \omega}{k_b T}} - 1 \right)^2} d\omega. \quad (14)$$

Для объяснения поведения и расчета низкотемпературной теплопроводности кристаллов ZnSe:Ni предлагается использовать как сечение резонансного рассеяния фононов на двухуровневых примесях (ионах Ni²⁺ с резонансной энергией между уровнями в несколько (3–5) мВ), так и сече-

ния аномального затухания фононов около температуры структурной неустойчивости $T_c = 14,5$ К решетки ZnSe с ионами никеля. Одновременный учет этих механизмов рассеяния фононов позволяет объяснить наблюдаемый весьма широкий ($\Delta T \approx 35$ К) и глубокий, $K_0/K_c \approx 200$ (гигантский), провал на кривой $K(T)$ ZnSe:Ni.

Таким образом, показано, что расчет температурной зависимости в модели Дебая при должном моделировании процессов рассеяния фононов на примесях, нанокластерах и с учетом наличия в системе фазового перехода, а также при оптимальном подборе параметров для нескольких образцов кристаллов ZnSe:Ni обеспечивает надежное согласие результатов расчета с экспериментом. Результаты расчетов для различных концентраций никеля сопоставляются с данными соответствующих экспериментов (рис. 3) по гигантскому тепловому сопротивлению в A^2B^6 .

С использованием (14) в работе также проведены расчеты зависимости $K(T)$ для кристаллов ТГС и показано [5], что нетипичное поведение кривой $K(T)$ около T_c в кристаллах ТГС связано с крайне узким интервалом температур, в котором проявляются критические флуктуации в одноосных кристаллах (рис. 4).

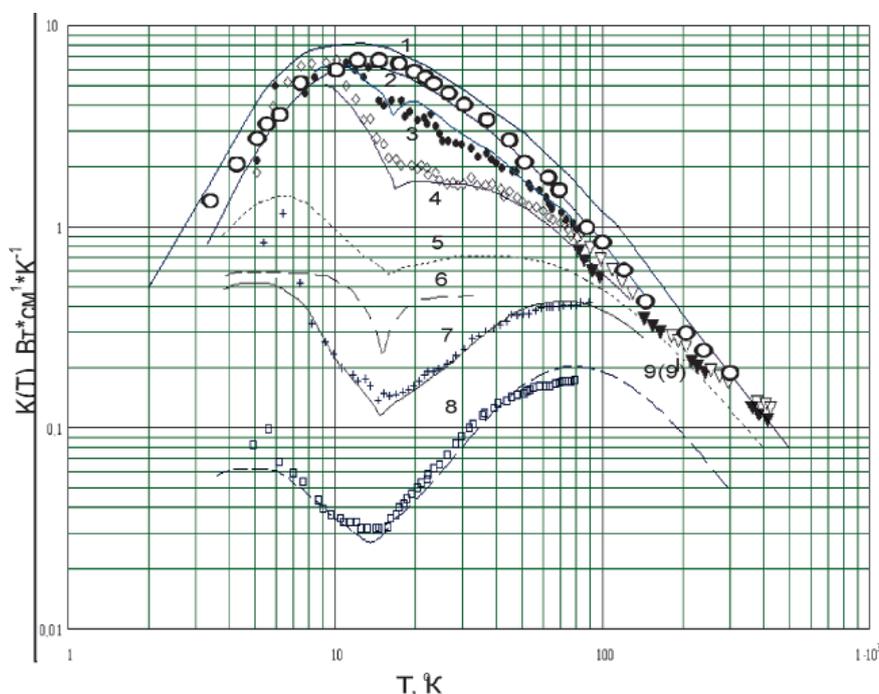


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности кристаллов ZnSe. Эксперимент [11]: (сверху вниз) 1, 2 (○; ●) – «чистый» ZnSe; 3, 7, 8 – образцы ZnSe:Ni с различной концентрацией никеля: 3 (◇) – $c_0 = 0,00043 (10^{21} \text{ см}^{-3})$, 7 (+) – 0,036, 8 (◊) – 0,10

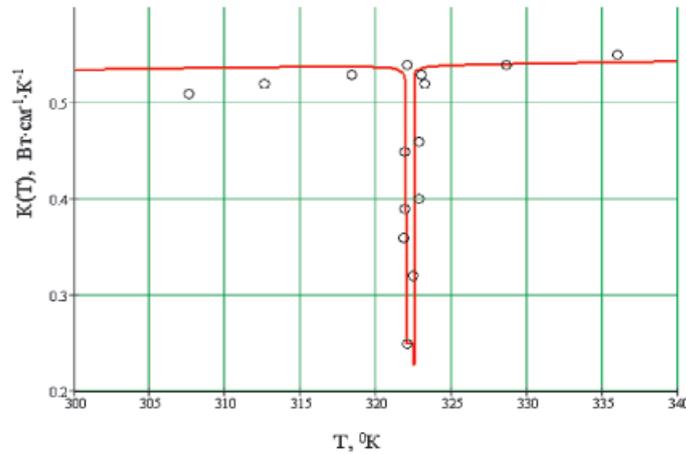


Рис. 4. Температурное поведение теплопроводности высококачественных кристаллов ТГС около $T_c = 322^\circ\text{K}$ в направлении [1, 12]

Таким образом, в ситуации, когда критические флуктуации (как в одноосном кристалле ТГС) относительно подавлены, а роль отдельных механизмов релаксации фононов при достаточно сильном ангармонизме ($T > \theta$) нивелирована («осреднена»), влияние критического рассеяния фононов около T_c резко выражено. В этом случае в узкой области ΔT_K , возможно, реализуется особое неравновесное (метастабильное или типа «спиновое стекло») состояние системы. При этом аномальное поведение теплопроводности вблизи T_c может оказаться весьма ярким – в крайне узком интервале температур ΔT_K появляется глубокий минимум (провал: рис. 4).

2.3. Модель эффекта гигантского усиления диэлектрической проницаемости в керамике на основе карбида кремния. В случае расчета диэлектрической проницаемости в керамике при вычислении соответствующих функций Грина приходится делать ряд предположений о форме и геометрии электромагнитного осциллятора, о его поляризационных характеристиках для сферической или эллипсоидальной форм. Если допустить, что включения (нановключения) молекул и комплексов AlN в матрице SiC по своим поляризационным характеристикам обладают сфероидальной (или эллипсоидальной) формой, то за исходную теоретическую предпосылку можно взять подход Максвелла – Гарнетта [3], объясняющий усиление $\epsilon(\omega)$ в матричных средах, содержащих включения сфероидальной (или эллипсоидальной) формы с отличающимся от единицы аспектным отношением $\xi = c/a$ ($a = b \neq c$ – полуоси сфероида).

В простейшем случае выражение для $\epsilon(\omega)$ можно получить путем замены в фор-

муле Максвелла – Гарнетта для сферических включений фактора деполяризации сферы, равного $1/3$, на фактор деполяризации сфероида $0 < A_c(\xi) < 2$, отвечающего заданной ориентации поля вдоль оси c и зависящего от аспектного отношения ξ сфероида. Тогда в случае твердого раствора для ДП $\epsilon(\omega)$ в направлении оси c получаем [5]

$$\epsilon = \epsilon_m \left[1 + \frac{\eta}{(1-\eta)A_c + \epsilon_m / (\epsilon_i - \epsilon_m)} \right]. \quad (15)$$

Результаты расчетов диэлектрической проницаемости сопоставляются с данными соответствующих экспериментов на рис. 5.

На рис. 5 для различных значений частоты ($\Gamma_m = \frac{\gamma_m}{\omega}$ и $\Gamma_i = 0$) электрического поля ω : 1 – $\Gamma_m = 100$; 2 – 200; 3 – 420; 4 – 750; 5 – 10^4 ; $A_c = 1,70$; $\epsilon'_m = 250$, $\epsilon'_i = 75$. Сплошные линии – расчет; точки – эксперимент при значениях частоты: $\omega = 1$ МГц; 10; 0,5 и 0,1 кГц

Обсуждение результатов и выводы

Разработанные выше модели (выражения и формулы п. 1.1–1.5)) использованы для описания свойств наноструктурированных материалов (рис. 1–5, п. 2.1–2.3). Эти свойства оказываются уникальными и определяют важную роль широкозонных полупроводников и наноструктурированных материалов в развитии элементной базы силовой электроники нового поколения [6–8]. В частности, характерные свойства SiC позволяют улучшить практически все (частотные, мощностные, прочностные) характеристики элементов (устройств) и приборов силовой электроники, оптоэлектроники и микросистемной техники.

При наличии структурного фазового превращения в этих системах рассеяние фононов на частоте мягкой моды играет доминирующую роль и определяет характер аномального поведения теплового сопротивления около T_c в A^2B^6 , ТГС и SiC. В работе построена модель переноса тепла (теплопроводности $K(T)$), проведены расчеты и дана интерпретация эффекта гигантского (на два порядка – 10^2) увеличения теплового сопротивления в кристаллах ZnSe:Ni.

Полученные формулы (выражения) использованы для расчетов температурной зависимости теплопроводности сегнетоэлектрических кристаллов триглицинсульфата (ТГС). Показано, что аномальное поведение кривой теплопроводности $K(T)$ около температуры структурного фазового перехода $T_c = 322^\circ\text{K}$ при относительно высоких значениях температур обусловлено осреднением фоновых времен релаксации (флуктуационный эффект биений). При этом критическое упругое и неупругое рассеяние фононов проявляется около T_c в виде резко выраженного узкого минимума. Результаты расчетов согласуются с данными соответствующих экспериментов.

параметры времен релаксации фононов и определены последовательные стадии дефектообразования, реализующиеся по мере легирования соединений типа A^2B^6 , кристаллов карбида кремния (SiC) и его политипов. Модель проводимости, развитая на основе формулы Кубо – Гринвуда для твердых растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$, $(\text{SiC})_{1-x}(\text{BeO})_x$ позволила рассчитать логарифмические зависимости проводимости этих растворов $(\ln \sigma_x(T))$ от концентрации x (состава) при различных значениях $10^4/T$. Выявлены особенности поведения $\sigma_x(T)$ от состава x в твердых растворах карбида кремния:

а) обусловленные андерсоновской локализацией носителей – немонотонная зависимость $\sigma_x(T)$ от состава x ;

б) особенность, связанная с наличием перехода Мотта изолятор – металл – типичные зависимости $\ln(\sigma/\sigma_0)$ вида $\left(\frac{\epsilon_a}{T}\right)^{1/4}$.

Результаты расчетов гигантского усиления диэлектрической проницаемости на низких частотах согласуются с данными экспериментов.

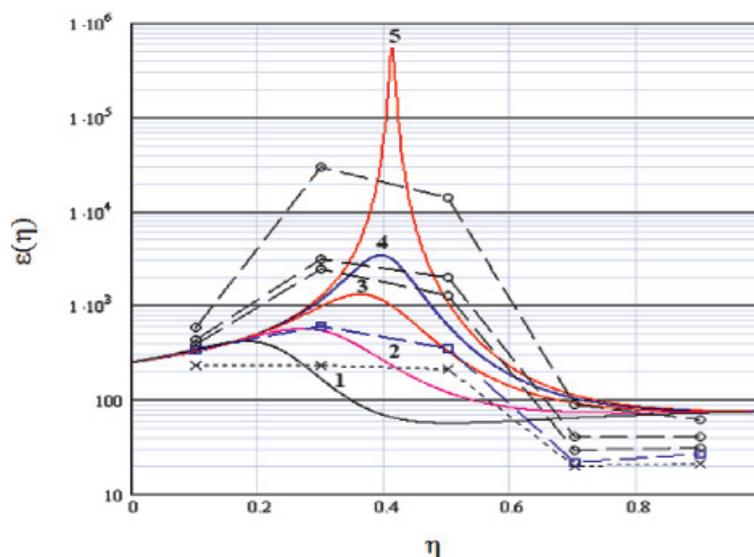


Рис. 5. Концентрационная зависимость диэлектрической проницаемости [10] керамики SiC-AlN с гигантским (на 10^2) усилением $\epsilon(\omega)$ на малых частотах

Предложенные модели механизмов рассеяния фононов на дефектах, нанокластерах и около T_c [2, 5] использованы для описания особенностей температурного поведения гигантского теплового сопротивления A^2B^6 , теплопроводности SiC и проводимости $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$. Подобраны

Таким образом, в работе продемонстрировано применение МДФГ и формул типа Кубо – Гринвуда для моделирования и описания свойств (теплопроводности, проводимости, диэлектрической проницаемости и др.) широкозонных полупроводников и наноструктурированных материалов, в том

числе на основе SiC. В рамках сформулированного подхода предложены модели, проведены расчеты и дана интерпретация ряда аномальных эффектов в широкозонных материалах силовой электроники. Результаты расчетов свойств и мезоскопических эффектов в широкозонных полупроводниках и наноструктурированных материалах конкретных систем позволяют надеяться, что подход МДФГ и формул типа Кубо – Гринвуда применим для описания широкого спектра свойств в наноструктурированных и мезоскопических материалах.

Список литературы

1. Алтухов В.И. Симметрия и структурные фазовые переходы в кристаллах. – Ставрополь: СевКавГТУ, 2003. – 96 с.
2. Алтухов В.И. Основы теории кинетических свойств кристаллов с дефектами и фазовыми переходами: диэлектрики и сегнетоэлектрики. – Ставрополь: СевКавГТУ, 2003. – 188 с.
3. Алтухов В.И., Казаров Б.А., Санкин А.В. Функциональные материалы нанoeлектроники – новые свойства и методы их описания: монография. – Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2011. – 165 с.
4. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику: пер. с англ. – М.: Физматлит, 2004. – 304 с.
5. Казаров Б.А., Алтухов В.И., Баландина Н.В. Моделирование и расчет тепловых, электрических свойств широкозонных полупроводников и диэлектриков (с дефектами, фазовыми переходами и нанокластерами). – Георгиевск: ГТИ (ф) СевКавГТУ, 2008. – 224 с.
6. Лучинин В., Таиров Ю. Карбид кремния – алмазоподобный материал с управляемыми наноструктурно-зависимыми свойствами // Наноиндустрия. – 2010. – № 1. – С. 36–40.
7. Лучинин В., Таиров Ю. Отечественный полупроводниковый карбид кремния: шаг к паритету // Современная электроника – 2009. – № 7. – С. 12–15.
8. Миллс Г. Карбид кремния для российской промышленности. Компания Cree приходит в Россию // Электроника: наука, технология, бизнес. – 2010. – № 8. – С. 4–6.
9. Сафаралиев Г.К., Стриханов М.Н., Каргин Н.И., Билалов Б.А., Шабанов Ш.Ш., Кардашова Г.Д. Керамические материалы на основе SiC: монография. – М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – 200 с.
10. Сафаралиев Г.К., Таиров Ю.М., Цветков В.Ф., Шабанов Ш.Ш., Пашук Е.Г., Офицерова Н.В., Авров Д.Д., Садыков С.А. Получение и свойства поликристаллических твердых растворов SiC – AlN // ФТП. – 1993. – Т. 27, Вып. 3. – С. 402–408.
11. Соколов, В.И. Необычно сильное резонансное изменение низкотемпературной теплопроводности кристаллов ZnSe: Ni, обусловленное рассеянием фононов на индуцированных заряженными примесями ангармонических модах / В.И. Соколов, А.Т. Лончаков // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Вып. 11–12. – Т. 73. – С. 708–711.
12. Струков Б.А., Белов А.А., Соркин Е.Л. Аномалии теплопроводности вблизи точки сегнетоэлектрического фазового перехода второго рода в одноосных сегнетоэлектриках // ФТТ. – 1991. – № 33. – Р. 691.

References

1. Altuhov V.I. Simmetrija i strukturnye fazovye perehody v kristallah. Stavro-pol': SevKavGTU, 2003. 96 p.
2. Altuhov V.I. Osnovy teorii kineticheskikh svojstv kristallov s defektami i fazovymi perehodami: dijelektriki i segnetojelektriki. Stavropol': SevKavGTU, 2003. 188 p.
3. Altuhov V.I., Kazarov B.A., Sankin A.V. Funkcional'nye materialy nanojelektro-niki novye svojstva i metody ih opisanija: monografija. NovoCherkassk: JuRGTU (NPI), 2011. 165 p.
4. Imri J. Vvedenie v mezoskopicheskuyu fiziku: per. s angl. M.: Fizmatlit, 2004. 304 p.
5. Kazarov B.A., Altuhov V.I., Balandina N.V. Modelirovanie i raschet teplovyh, jelek-tricheskikh svojstv shirokozonyh poluprovodnikov i dijelektrikov (s defektami, fazovymi perehodami i nanoklastalami). Georgievsk: GTI (f) SevKavGTU, 2008. 224 p.
6. Luchinin V., Tairov Ju. Karbid kremnija almazopodobnyj material s upravljaemymi nanostrukturno-zavisimymi svojstvami // Nanoindustrija. 2010. no. 1. pp. 36–40.
7. Luchinin V., Tairov Ju. Otechestvennyj poluprovodnikovyy karbid kremnija: shag k paritetu // Sovremennaja jelektronika 2009. no. 7. S. 12–15.
8. Mills G. Karbid kremnija dlja rossijskoj promyshlennosti. Kompanija Cree prihodit v Rossiju // Jelektronika: nauka, tehnologija, biznes. 2010. no. 8. pp. 4–6.
9. Safaraliev G.K., Strihanov M.N., Kargin N.I., Bilalov B.A., Shabanov Sh.Sh., Kardashova G.D. Keramicheskie materialy na osnove SiC: monografija. M.: NIJaU MIFI, 2011. 200 p.
10. Safaraliev G.K., Tairov Ju.M., Cvetkov V.F., Shabanov Sh.Sh., Pashuk E.G., Oficerova N.V., Avrov D.D., Sadykov S.A. Poluchenie i svojstva polikristallicheskih tvjordyh rastvorov SiC AlN // FTP. 1993. –Т. 27, Вып. 3. pp. 402–408.
11. Sokolov, V.I. Neobychno sil'noe rezonansnoe izmenenie nizkotemperaturnoj teplo-provodnosti kristallov ZnSe: Ni, obuslovlennoe rassejanem fononov na inducirovannyh zarjzhenymi primesjami angarnonicheskikh modah / V.I. Sokolov, A.T. Lonchakov // Pis'ma v ZhJeTF. 2001. Vyp. 11–12. T. 73. pp. 708–711.
12. Strukov B.A., Belov A.A., Sorkin E.L. Anomalii teploprovodnosti vblizi tocki segnetojelektricheskogo fazovogo perehoda vtorigo roda v odnoosnyh segnetojelektrikah // FTT. 1991. no. 33. pp. 691.

Рецензенты:

Янусян Э.Г., д.ф.-м.н., профессор кафедры физико-математических дисциплин, декан инженерного факультета Института сервиса, туризма и дизайна (филиала) СКФУ, г. Пятигорск;

Чернобабов А.И., д.ф.-м.н., профессор кафедры физико-математических дисциплин Института сервиса, туризма и дизайна (филиала) СКФУ, г. Пятигорск.

Работа поступила в редакцию 09.02.2015.