

РОЛЬ ПАРАМЕТРА ГРЮНАЙЗЕНА В АНИЗОТРОПИИ РЕШЕТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА GaS

М.М. КУРБАНОВ, С.Дж. МАМЕДОВ, Е.Г. МАМЕДОВ

*Сумгаитский Государственный Университет
AZ5000 г. Сумгаит 43-й квартал*

А.Б. МАГЕРРАМОВ

*Институт Физики
Национальной Академии Наук Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33*

В работе приведены результаты вычисления характеристической температуры Дебая, параметров Грюнайзена и решеточной теплопроводности монокристалла GaS на основании экспериментальных данных теплового расширения и изотермической сжимаемости, измеренных в направлениях перпендикулярном и параллельном слоям.

Предполагается, что анизотропия параметров Грюнайзена и решеточной теплопроводности обусловлена изменением химической связи в зависимости от кристаллографических направлений.

The calculation results of Debye character temperature, Grunayzen parameters and lattice heat conductivity of GaS monocrystal on the base of experiment data of thermal expansion and isothermal compressibility, measured in directions, which are perpendicular and parallel to layers, are given in the paper.

It is supposed, that anisotropy of Grunayzen parameters and lattice thermal conductivity is caused by change of chemical bond in the dependence on crystallographic directions.

Экспериментальные значения тепловых параметров монокристаллов соединения кристаллизующихся в слоистых и цепочечных структурах позволяет проверить существующие теоретические модели и получить более точную корреляцию между тепловыми параметрами.

Определение решеточной теплопроводности в кристаллах также позволяет определить характер температурной зависимости тепловых параметров [1].

В теории показано, что в области выше Дебаевской характеристической температуры (θ_D), решеточную теплопроводность (κ_L) можно вычислить по формуле [2].

$$\kappa_L = \frac{12}{5} 4^{1/3} \left(\frac{K}{h} \right)^3 \frac{M \delta \theta_D^3}{\gamma^2 T} \quad (1)$$

где k - постоянная Больцмана, h - постоянная Планка, M - атомарная масса, δ^3 - объем приходящегося на один атом и γ - параметр Грюнайзена.

Для халькогенида галлия из экспериментальных данных были определены коэффициенты теплового расширения, изотермическая сжимаемость и удельная теплоемкость [3,4].

Значения коэффициентов теплового расширения и изотермической сжимаемости приведены в таблице. Данные параметры определены с точностью ~0,5%.

Используя данные из таблицы по термодинамическому соотношению

$$\gamma = \frac{3\alpha V}{\chi_T C_V} \quad (2)$$

и по эмпирической формуле

$$\theta_D = \frac{19,37}{(\bar{A} V^{2/3} \alpha)^{1/2}} \quad (3)$$

вычислены также параметр Грюнайзена и характеристическая температура Дебая [5].

В формулах (2) и (3), α - коэффициент линейного расширения, C_V - удельная теплоемкость, χ_T - коэффициент изотермической сжимаемости и V - атомарный объем.

При комнатной температуре Дебаевская характеристическая температура для GaS составляет ~186K. Учитывая это в области температур 200 ÷ 300K, по формуле (1) в направлении слоев и перпендикулярно к ним вычислены решеточная теплопроводность для GaS. Результаты вычислений также приведены в таблице.

Как видно из таблицы, в обоих направлениях с увеличением температуры теплопроводность решетки уменьшается. В измеренном температурном интервале значение решеточной проводимости в направлении слоев ($\kappa_L^{\parallel}$) в 1,2 раза больше, чем в перпендикулярном направлении ($\kappa_L^{\perp}$). В интервале температур 200 ÷ 300K решеточной теплопроводности в обоих направлениях уменьшается на ~20%.

Такую анизотропию решеточной теплопроводности в GaS можно объяснить тем, что в направлении слоев между атомами существует более сильная ковалентная связь, а между слоями слабая Ван-дер-Ваальсовая связь.

Вследствие этого, в направлении слоев значение степени ангармоничности и коэффициент теплового расширения будет меньше, чем в перпендикулярном направлении. Вследствие чего степень рассеивания фононов и тепловое сопротивление изменяется.

Относительно малую анизотропию решеточной теплопроводности в GaS можно связать с тем, что взаимодействие между слоями в массивных образцах больше по сравнению с тонкими.

Таблица

T, K	$\alpha_{\perp} \cdot 10^6, \frac{1}{K}$	$\alpha_{\parallel} \cdot 10^6, \frac{1}{K}$	$\chi_{\perp} \cdot 10^{11}, \frac{m^2}{N}$	$\chi_{\parallel} \cdot 10^{11}, \frac{m^2}{N}$	$\gamma_{\perp}$	$\gamma_{\parallel}$	$\alpha_L^{\perp}, \frac{1}{Vt \cdot m^{-1} K^{-1}}$	$\alpha_L^{\parallel}, \frac{1}{Vt \cdot m^{-1} K^{-1}}$
200	8,12	7,52	0,334	0,305	1,88	1,68	2,12	2,61
210	8,23	7,64	0,337	0,309	1,87	1,67	2,05	2,56
220	8,35	7,75	0,241	0,313	1,85	1,66	2,01	2,38
230	8,47	7,86	0,345	0,317	0,83	1,65	1,95	2,31
240	8,54	7,93	0,348	0,319	1,81	1,63	1,91	2,24
250	8,65	8,05	0,352	0,323	1,78	1,62	1,85	2,23
260	8,71	8,09	0,356	0,327	1,77	1,60	1,83	2,14
270	8,78	8,12	0,359	0,331	1,76	1,58	1,78	2,09
280	8,87	8,15	0,363	0,336	1,75	1,57	1,72	2,05
290	8,95	8,19	0,368	0,340	1,73	1,54	1,70	2,02
300	9,02	8,25	0,371	0,342	1,72	1,52	1,68	2,01

-
- [1]. М.М.Зарбалиев. Твердые растворы замещения в системе $TlInTe_2-TlYbTe_2$. Российская АН. Неорганические материалы, 1999, т.35, с.560-564
- [2]. Дж.Драбл, Г.Голдсמיד. «Теплопроводность полупроводников». Изд. иностр. лит., Москва, 1963, СТР. 172
- [3]. Н.Г.Алиев, И.Г.Керимов, М.М.Курбанов, Т.А.Мамедов. «Анизотропия линейного теплового расширения и изотермической сжимаемости монокристаллов халькогенидов и теллурида галлия». Химическая связь в полупроводниках и полуметаллах. Изд. Наука и техника, Минск, 1972, стр. 313-318
- [4]. К.К.Мамедов, М.А.Алджанов, И.Г.Керимов, М.И.Мехтиеv. «Теплоемкость и моменты колебательного спектра монокхалькогенидов галлия». ФТТ, 1978, т.20, вып.1, с.42-47
- [5]. М.М.Курбанов. «Тепловое расширение и изотермическая сжимаемость $TlInTe_2$ », Неорганические материалы, 2005, том 41, №12, стр.1-3.

Received: 10.02.2007