



Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005" International Conference "Fizika-2005" Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9
iyun
June 2005
Июнь

№96
səhifə
page 370-372
стр.

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ $TiGaSe_2$

ЕФИМОВ В. Б.¹, МЕЖОВ-ДЕГЛИН Л. П.¹, АБДУЛЛАЕВ Н. А.², КЕРИМОВА Т. Г.²

¹Институт физики твёрдого тела Российской АН,
142432, Моск. обл., г. Черноголовка.
e-mail: efimov@issp.ac.ru

²Институт физики НАН Азербайджанской республики,
AZ-1143, г. Баку, пр. Джавида, 33.
e-mail: anadir@azintex.com, телефон: 439-51-63.

Исследована теплопроводность монокристаллов $TiGaSe_2$ в плоскости слоёв в интервале температур 20 – 220 К. Выявлено, что с уменьшением температуры в области фазового перехода, а именно при температуре $T \sim 103$ К, происходит резкое уменьшение величины теплопроводности ($\Delta k \sim 2 - 3\%$). При этом гистерезиса в температурном поведении теплопроводности обнаружено не было. Оценены длины свободного пробега фононов при различных температурах. Показано, что с понижением температуры в области температур $100K < T < 220K$ теплопроводность слабо уменьшается, а при $20K < T < 100K$ теплопроводность резко возрастает в соответствии с $k \sim T^{-1}$, что свидетельствует о преобладающей роли процессов рассеяния фононов на фононах.

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединение $TiGaSe_2$ обладает слоистой структурой строения, кристаллизуется при комнатной температуре в моноклинную псевдотетрагональную структуру с основными параметрами решетки $a=b=10,75\text{Å}$ и $c=15,56\text{Å}$, углом $\beta \sim 100^\circ$ и классифицируется пространственной группой C_{2h}^6 [1,2]. Трансляционные вектора решётки \vec{a} и \vec{b} лежат в плоскости слоёв и взаимно перпендикулярны, а вектор \vec{c} составляет небольшой угол $\sim 10^\circ$ с нормалью к плоскости слоёв. Связь между слоями слабая, типа Ван-дер-Ваальсовой, внутри слоёв – сильная, ковалентная с некоторой долей ионной связи.

Анизотропная кристаллическая структура обуславливает анизотропию физических свойств. Например, отношение упругих постоянных $C_{11}/C_{33} \sim 1,5$ (упругая постоянная C_{11} характеризует связь между атомами в плоскости слоёв, а C_{33} – межслоевую связь) [3]. Тепловое расширение в направлении перпендикулярном слоям

характеризуется большими значениями коэффициента линейного теплового расширения (КЛТР) при комнатной температуре, в то время как в плоскости слоёв – КЛТР мал.

В настоящее время известно, что монокристаллы $TiGaSe_2$ претерпевают с понижением температуры фазовый переход (ФП) в сегнетоэлектрическую соразмерную фазу через промежуточную несоразмерную. Согласно [4], в $TiGaSe_2$ ФП в сегнетоэлектрическую фазу при температуре $T=107K$ предшествует переход в состояние с пространственной модуляцией структуры при $T=120K$, впоследствии подтверждённое исследованиями дифракции медленных нейтронов [5]. ФП сопровождается учетверением параметра элементарной ячейки вдоль оси C и возникновением спонтанной поляризации в плоскости слоёв. Поскольку при структурном ФП происходят существенные изменения в фоновой подсистеме кристалла, то естественно предположить, что в области ФП в физических явлениях, определяемых фоновой подсистемой, таких как, например, теплоёмкость, тепловое расширение, теплопроводность и др., могут наблюдаться характерные

особенности. Действительно, авторы [6] в области температур ФП обнаружили характерные скачки теплоёмкости, а исследования теплового расширения [7] выявили, что в области температур ФП происходит скачок в величине КЛТР в направлении перпендикулярном слоям, сопровождающийся сильным сжатием кристалла в плоскости слоёв. Вышеперечисленное обуславливает интерес к исследованиям температурного поведения теплопроводности слоистых монокристаллов $TlGaSe_2$.

В настоящей работе приводятся результаты первых исследований теплопроводности монокристаллов $TlGaSe_2$. Измерения транспортных характеристик кристаллов, кроме изучения их термодинамических свойств, позволяют оценить качество образцов, определить характерные параметры дефектов, ограничивающих пробеги фононов при низких температурах. Одним из вопросов, на которые мы пытались ответить в данном исследовании, был вопрос о влиянии структурного перехода соизмеримость-несоизмеримость (фазовый переход второго рода при температурах порядка 110K) на теплопроводность монокристаллов $TlGaSe_2$, что позволило бы объяснить механизмы образования дефектов, эффективно рассеивающих фононы.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Монокристаллы $TlGaSe_2$ были выращены методом Бриджмена. Образцы для исследований получались из монокристаллических слитков, простым скалыванием вдоль поверхности, содержащей плоскость слоя. Для измерений использовался образец $TlGaSe_2$ с сечением $1,9 \times 0,6$ мм², длина кристалла была 6 мм. При измерениях расстояние между термометрами составляло 2.7 мм.

Измерения теплопроводности проводились в гелиевом криостате вдоль плоскости слоев потенциометрическим методом в стационарном тепловом потоке. Теплопроводность вычислялось по соотношению $\dot{Q} = \kappa \frac{\Delta T}{L} S$, где поток тепла

определяется теплопроводностью образца, градиентом температуры и сечением образца. Разность температур на образце в этих экспериментах измерялась дифференциальной хромель-константановой термопарой с диаметром проволок 20 мкм. Точность измерения абсолютной величины теплопроводности была порядка 20% и определялась точностью измерения геометрических размеров образца и положений термометров. Относительная точность измерений теплопроводности определялась чувствительностью термопары и погрешностью прибора, и составляла величину меньше 5%. Абсолютная температура измерялась по калиброванному платиновому термометру, находившемуся в хорошем тепловом контакте с монтажной подложкой. Применение платинового термометра и хромель-константановой термопары ограничило область измерения температурами выше ~20 К. Стабилизация температуры измерения

осуществлялась регулятором температуры. Измерения проводились как в режиме охлаждения, так и при нагреве.

Первоначально измерения проходили при охлаждении прибора только жидким азотом. При этих измерениях теплопроводность остаточных газов в рубашке вносила свой вклад в отток тепла от нагревателя, так что по этим измерениям можно судить только об относительном поведении теплопроводности. На графиках это отмечено в виде относительных величин на оси теплопроводности. Эти измерения (рис.1) выявили отсутствие гистерезиса, т.е. температурная зависимость при первом и последующих охлаждениях кристалла (черные квадраты) с экспериментальной точностью совпадали с кривой, полученной при нагреве (кружочки).

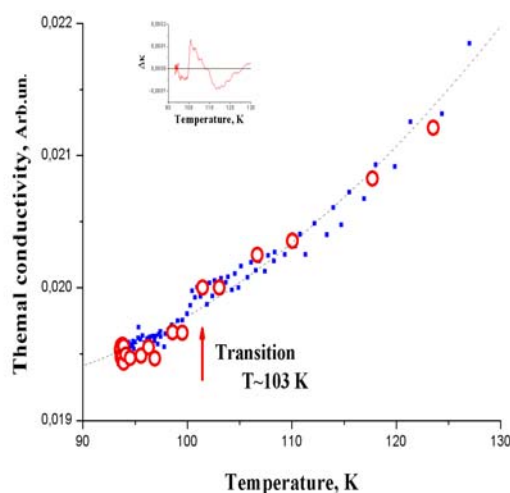


Рис.1. Температурное поведение теплопроводности при высоких температурах ($90K < T < 220K$).

Это указывает на то, что фазовый переход при $T \sim 103$ К, регистрируемый как резкое уменьшение величины теплопроводности с уменьшением температуры, не сопровождается сильными искажениями самой кристаллической решетки. На вставке построена разность между экспериментальными точками при охлаждении и плавной кривой (штрихованная кривая). Вторая серия измерений проводилась при охлаждении вакуумной рубашки прибора жидким гелием, что сделало утечки тепла остаточным газом пренебрежимо малым. Результаты этих измерений приведены на рис.2. При охлаждении до 90 К теплопроводность кристалла слабо меняется с температурой, имея лишь особенность при температуре фазового перехода. При дальнейшем охлаждении теплопроводность начинает возрастать, что объясняется увеличением длины пробега фононов при Umklapp-процессах. Результаты измерений теплоемкости [6] дают для Дебаевской температуры величину порядка 200 К, тогда при охлаждении ниже температуры Дебая, т.е. при $T < \theta$, фонон-фононное рассеяние начинает уменьшаться. При этом температурная зависимость теплопроводности возрастает от T^{-1} к T^{-2} и выше, что объясняется разложением слабой экспоненциальной зависимости

увеличения длины пробега фононов по степеням температуры. Абсолютные величины теплопроводности, полученные при охлаждении и отогреве образца, хорошо совпадали друг с другом и были несколько ниже величин, полученных при охлаждении прибора жидким азотом.

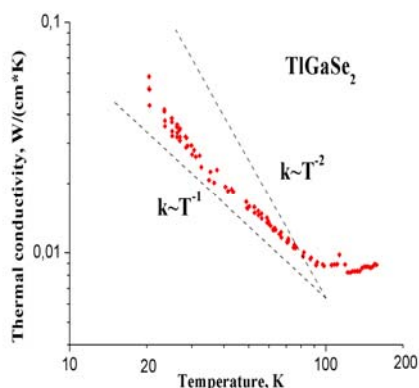


Рис.2. Температурное поведение теплопроводности при низких температурах ($20\text{K} < T < 100\text{K}$).

Фононная теплопроводность достаточно хорошо описывается простой газокINETической формулой $\kappa = 1/3C * \bar{v} * L$, где C - теплоемкость кристалла, \bar{v} - скорость распространения фононов (скорость звука), L - длина свободного пробега фононов. Таким образом, по экспериментальным данным можно оценить длины пробега фононов. Для этих оценок мы использовали экспериментальные данные по теплоемкости [6] и результаты измерения скорости звука [3], хотя эти последние величины не сильно отличаются от вычисленных значений по Дебаевским температурам (данные по теплоемкости) [8]:

$$\theta = \frac{2h}{\pi\kappa} \left(\frac{3N}{4\pi V} \right)^{1/3} \bar{v}, \text{ где средняя скорость звука есть}$$

$$\bar{v} = \left(\frac{e_{11} + 2e_{44}}{3\rho} \right)^{1/2} \quad \text{или} \quad \bar{v} = \left(\frac{v_L^2 + 2v_T^2}{3} \right)^{1/2}.$$

Впрочем, для оценок вполне подойдет и совсем простое соотношение $v = a\theta_D k_B / \hbar$. Результаты наших оценок длин пробега фононов приведены на рис. 3.

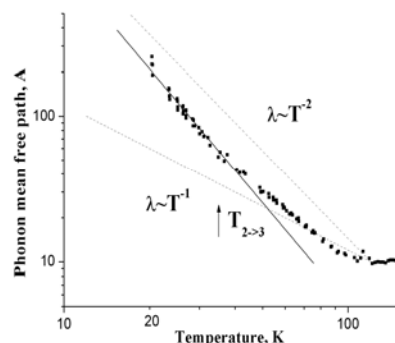


Рис.3. Температурная зависимость длины свободного пробега фононов при температурах ниже 100К.

При высоких температурах длины пробега фононов близки к размерам элементарной решетки. В этом случае более правильно было бы говорить не о фононах, как о когерентных колебаниях решетки (модель фононного транспорта Дебая [9]), а о транспорте тепла в системе слабо взаимодействующих элементарных квантовых осцилляторов (модель теплопроводности Эйнштейна [10]). С понижением температуры длина пробега фононов начинает увеличиваться и при температуре 20 К достигает сотен ангстрем. В наших экспериментах при охлаждении вплоть до $T \sim \theta/10$ мы не наблюдали доминирующего рассеяния фононов дефектами решетки, т.е. качество кристаллов было достаточно высоким. Изменение наклона при температурах ниже 40 К может быть связано с переходом от двумерного распространения фононов в слоистой структуре к трехмерному случаю. Длины пробега при переходе составляют величины порядка нескольких параметров решетки по оси c . Для окончательного выяснения этого вопроса необходимы измерения теплопроводности этих же слоистых кристаллов поперек слоев, где при тех же температурах должна наблюдаться особенность в температурной зависимости.

Авторы благодарны А.В.Лохову за помощь в экспериментах. Работа была выполнена в рамках договора о научно-техническом сотрудничестве между Институтом физики НАН Азербайджана и Институтом физики твёрдого тела РАН.

- [1]. T. J. Isaaks, J. D. Feichter, J. Sol. St. Chem. **14**, 3, 260, (1975).
- [2]. D. Muller, H. Hahn, Z. Anorg. Allgem. Chem. **438**, 258, (1978).
- [3]. Ю. В. Илизавский, В. М. Стернин, Р.А.Сулейманов, Ф. М. Салаев, М. Ю. Сеидов. ФТТ. **33**, 1, 104 (1991); Р. А. Сулейманов, М. Ю. Сеидов, Ф. М. Салаев. ФТТ. **33**, 6, 1797 (1991).
- [4]. А. А. Волков, Ю. Г. Гончаров, Г. В. Козлов, С.П. Лебедев, А. М. Прохоров, Р. А. Алиев, К. Р. Аллахвердиев. Письма в ЖЭТФ. **37**, 11, 517, (1983).
- [5]. С. Б. Вахрушев, Б. Е. Квятковский, Н. М. Окунева, К. Р. Аллахвердиев, Р. М. Сардарлы. Препринт № 81 ФТИ им А.Ф.Иоффе, Л., 1984).
- [6]. С. Г. Абдуллаева, А. М. Абдуллаев, К. К. Мамедов, Н. Т. Мамедов. ФТТ, **26**, 2, 618, (1984).
- [7]. Н. А. Абдуллаев, Т. Г. Мамедов, Р. А. Сулейманов, ФНТ, **27**, 8, 915, (2001).
- [8]. Post E. J., Canad. Journ. Phys., **31**, 112, 1953.
- [9]. P. Debye, Ann. Phys., **39**, 789 (1912).
- [10]. A. Einstein, Ann. Phys., **22**, 180 (1907).

