

© 1991

ПРОВОДИМОСТЬ АКСИАЛЬНО-ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

В. В. Лопатин

Для расчета эффективной проводимости анизотропных материалов предлагается использовать выражения, связывающие анизотропную проводимость кристаллитов в разных кристаллографических направлениях и степень текстурированности с проводимостью аксиально-текстурированного поликристалла. Возможности такого подхода проиллюстрированы расчетом проводимости кристаллитов графитоподобного нитрида бора, изготовленного по разной технологии. Обсуждена необходимость учета анизотропии концентрации границ в разных направлениях диэлектрических поликристаллов, поскольку они рассеивают носители заряда.

Для расчета проводимости σ (теплопроводности, диэлектрической и магнитной проницаемости) поликристаллов, состоящих из кристаллитов с различной проводимостью σ_1 и σ_2 , используют теорию эффективной среды [1] или преобразование симметрии электрических полей [2, 3]. Проводимость поликристаллов в двумерном случае в этих рамках определяется как

$$\sigma_{\phi} = k(\sigma_1\sigma_2)^{1/2}, \quad (1)$$

где k может принимать различные значения в зависимости от содержания компонент с проводимостью σ_1 и σ_2 , а индексам «1» и «2» соответствуют компоненты с высокой и низкой проводимостью.

Очевидно, что эти же выражения могут быть использованы при определении эффективных параметров статистически изотропных поликристаллов, состоящих из анизотропных по свойствам кристаллитов. Индексам «1» и «2» будут соответствовать тогда направления высокой и низкой проводимости. Это соображение с учетом геометрических факторов преимущественного протекания тока позволило для σ двумерных и трехмерных поликристаллов получить выражение, асимптотически приближающееся к (1) [4]; в работе [5] для оценки рекомендовано выражение $\sigma_{\phi} = \sigma_1/2$.

В этой же работе получены точные решения, позволяющие достаточно просто вычислить две компоненты σ анизотропных аксиально-текстурированных поликристаллов, состоящих из двумерных анизотропных кристаллитов, для случая «острой» функции распределения их ориентировок и большой разницы проводимости кристаллитов в разных направлениях σ_1 и σ_2 . Для более сложных текстур вычисление тензора проводимости в рамках метода эффективной среды также возможно, если будет найден способ усреднения проводимости отдельных кристаллитов по функции распределения ориентировок кристаллитов.

В настоящей работе сделана попытка связать σ аксиально-текстурированных поликристаллов с проводимостью анизотропных кристаллитов при любых их значениях и произвольной функции распределения ориентировок (ФРО). Текстура зависит от технологии получения и свойственна поликристаллам, состоящим из кристаллитов любой, кроме кубической сингонии. Широкий класс анизотропных материалов обладает аксиальной текстурой, т. е. упорядочением расположения кристаллитов в одном на-

правлении, обычно совпадающем с каким-либо технологическим направлением: осаждения, прессования, эпитаксии и т. д., но беспорядком в другом, азимутальном, направлении.

Обозначим проводимость во взаимно перпендикулярных макроскопических a - и c -направлениях поликристалла σ_a и σ_c (рис. 1; c совпадает с осью аксиальной текстуры), а проводимость кристаллитов в a - и c -направлениях решений — σ_{ka} и σ_{kc} . Здесь σ_{ka} и σ_{kc} , σ_a и σ_c являются главными значениями тензоров проводимости кристаллита $\hat{\sigma}_k$ и поликристалла $\hat{\sigma}$ соответственно (третья компонента тензоров проводимости из-за беспорядка расположения кристаллитов в азимутальном направлении $\sigma_{kb} = \sigma_{ka}$ и $\sigma_b = \sigma_a$). Направление тока $\mathbf{j} = \mathbf{n}'$, σE совпадает с осью c текстуры, а \mathbf{n} — с осью c кристаллита и соответственно с σ_{kc} . Связь между проводимостью кристаллитов и поликристалла будем определять исходя из предположения, что анизотропия поликристалла обусловлена только $\hat{\sigma}_k$ и ФРО кристаллитов, но не зависит от их границ.

Для такой геометрии при любых значениях σ_{ka} и σ_{kc} одноосных кристаллитов вычисление тензора проводимости поликристалла $\hat{\sigma}$ упрощается, и, согласно [6], в принятых терминах он может быть записан в виде

$$(\mathbf{n}', \hat{\sigma} \mathbf{n}) = \sigma(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \sigma_{kc} + (\sigma_{ka} - \sigma_{kc})(\mathbf{n}', \mathbf{n})^2. \quad (2)$$

Поскольку вероятность ориентации кристаллитов, ось c которых совпадает с направлением \mathbf{n} , равна $W(n)dn$, то, усредняя проводимость для всего поликристалла, получим

$$\sigma(\mathbf{n}') = \int W(n)dn \cdot \sigma(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \sigma_{kc} + (\sigma_{ka} - \sigma_{kc}) \int (\mathbf{n}', \mathbf{n})^2 W(n)dn. \quad (3)$$

Таким образом, проводимость поликристалла в произвольном направлении и соответственно компоненты $\hat{\sigma}$ можно определить после интегрирования ФРО кристаллитов.

Обозначим значение интеграла в (3) текстурным параметром b . Для аксиальной текстуры ФРО симметрична относительно оси c поликристалла, т. е. зависит только от аксиального угла α (рис. 1). Тогда параметр текстуры определяется как

$$b(\alpha) = \int_0^{\pi/2} W(\alpha) \cos^2 \alpha d\alpha. \quad (4)$$

Заменив интеграл в (3) параметром текстуры и проведя преобразования, для σ_a и σ_c поликристалла получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \sigma_c &= \sigma_{ka}(1-b) + \sigma_{kc}b, \\ \sigma_a &= \sigma_{ka}\left(\frac{1+b}{2}\right) + \sigma_{kc}\left(\frac{1-b}{2}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Пределы изменения параметра текстуры $1/3 \leq b \leq 1$: $b=1$ для абсолютно текстурированных материалов, когда $\sigma_a = \sigma_{ka}$ и $\sigma_c = \sigma_{kc}$; $b=1/3$ для изотропных материалов, когда $\sigma_a = \sigma_c$ и $\sigma_{ka} = \sigma_{kc}$.

Полученные уравнения (5) позволяют рассчитать компоненты тензора аксиально-текстурированных поликристаллов, если известна проводимость кристаллитов в анизотропных направлениях и определена ФРО.

В одноосных поликристаллах для экспериментального определения ФРО достаточно, не строя полной полюсной фигуры, измерить зависимость интенсивности вульф-брэгговского отражения $I(\theta)$ (θ — угол наклона образца относительно рентгеновского пучка) от базовой плоскости решетки. Вероятность ориентации кристаллитов $W(\alpha)$ тогда можно определить из соотношения $W(\alpha)/W(\alpha=0) = I(\theta)/I(\theta=0)$, т. е. нормированием экспериментальной кривой $I(\theta)$, а параметр текстуры b — интегрированием (4). Аналитическое определение обеспечивает достаточную точность, если ФРО «острая», например подчиняется нормальному

или нормально-эллиптическому закону. Однако реальные материалы, даже в рамках аксиально-симметричной текстуры, чаще имеют более сложную ФРО, поэтому целесообразно использовать численное интегрирование.

Заметим, что система (5) позволяет рассчитать не только σ_a и σ_c по известным σ_{ka} , σ_{kc} и b , но и определить σ_{ka} и σ_{kc} по измерениям σ_a , σ_c и b . Такая задача возникает при исследовании высокодисперсных поликристаллов, синтезировать монокристаллы которых не удастся, например материалов на основе нитридов В, Al и Si [7], пресованной сверхпроводящей керамики [5], графита и др.

Способ был апробирован нами для определения σ_{ka} и σ_{kc} аксиально-текстурированных поликристаллов гексагонального графитоподобного нитрида бора (α -BN), изго-

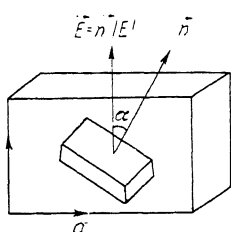


Рис. 1.

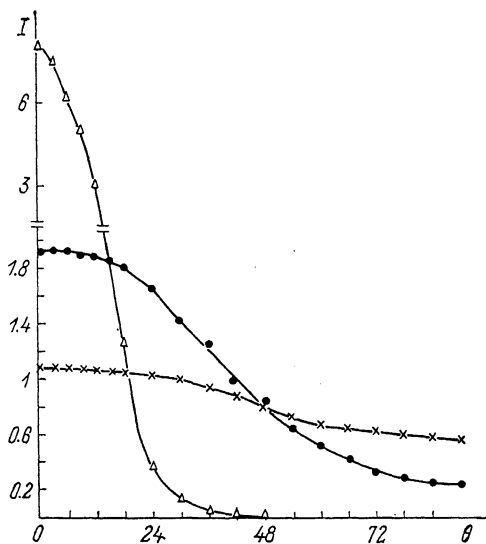


Рис. 2.

товленного газофазным осаждением (пиронитрид бора — ПНБ) и горячим пресованием порошка — $\text{BN}_{\text{тп}}$.

Проведенные ранее измерения $I(\theta)$ ПНБ [8] выявили сильную зависимость ФРО от плотности материала, поэтому измерения σ_a , σ_c и $I(\theta)$ проведены для плотного ($\sim 2.15 \text{ г/см}^3$) ПНБ_{пл} и коммерческого ($\sim 1.9 \text{ г/см}^3$) ПНБ_к. Значения b , вычисленные интегрированием измеренных на ДРОН-ЗМ текстурных функций (рис. 2), приведены в таблице. Там же приведены измеренные по методике, описанной в [7], σ_a и σ_c при $T=293$ (область при-

Материал	b	$T, \text{ К}$	σ_a	σ_c	σ_{ka}	σ_{kc}
			$\text{Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$			
ПНБ _{пл}	0.9724	293	$8.2 \cdot 10^{-16}$	$5.5 \cdot 10^{-17}$	$8.1 \cdot 10^{-16}$	$7.9 \cdot 10^{-17}$
		1293	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$4.0 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$3.9 \cdot 10^{-7}$
ПНБ _к	0.7229	293	$1.7 \cdot 10^{-16}$	$9.0 \cdot 10^{-17}$	$2.2 \cdot 10^{-16}$	$6.0 \cdot 10^{-17}$
		1293	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$6.4 \cdot 10^{-7}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$6.5 \cdot 10^{-7}$
$\text{BN}_{\text{тп}}$	0.5822	293	$5.0 \cdot 10^{-16}$	$2.8 \cdot 10^{-16}$	$4.6 \cdot 10^{-16}$	$3.3 \cdot 10^{-17}$
		1293	$1.3 \cdot 10^{-6}$	$9.5 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$5.6 \cdot 10^{-7}$

месной проводимости) и 1293 К (область собственной проводимости, где по некоторым данным имеет место ионный перенос), а также вычисленные решением системы (5) значения проводимости кристаллитов

$$\sigma_{kc} = [2(1-b)\sigma_a - (1-b)\sigma_c] / (1-3b),$$

$$\sigma_{ka} = [(1-b)\sigma_c - 2b\sigma_a] / (1-3b).$$

Близость полученных значений σ_{ka} и σ_{kc} различных материалов при разных механизмах электропереноса ($T=293$ и 1293 К) свидетельствует о возможности использования предложенного метода для учета влияния текстуры при определении эффективных параметров поликристаллов.

Достоинством предлагаемого способа в сравнении с методом эффективной среды является возможность его применения для любых соотношений σ_{ka} и σ_{kc} и любых, определенных по стандартным методикам, текстурных функций. Однако если в рамках теории эффективной среды можно получить общее решение, то реализовать предлагаемый подход для трехмерного поликристалла, не обладающего аксиальной текстурой, вряд ли удастся из-за необходимости учета 3-й компоненты тензора проводимости и значительного усложнения выражения (2).

Необходимо заметить, что под сопротивлением кристаллита мы понимали сумму сопротивлений кристаллита и межкристаллитных границ. Последние в диэлектриках и полупроводниках обычно слабопроводящие, т. е. границы являются барьерами для носителей заряда. Поэтому несовпадение рассчитанных σ_{ka} и σ_{kc} может быть обусловлено не только отклонением от аксиальной текстуры, но и различной анизотропией размеров кристаллитов и межкристаллитных границ в разных материалах. Например, как следует из особенностей строения α -BN [8, 9], концентрация границ в направлении оси текстуры, совпадающем с направлением c поликристалла, приблизительно на порядок выше, чем в ортогональном a -направлении. Если материал высокодисперсный (например, у ПНБ размеры кристаллитов 100—300 и 5—8 нм соответственно в a - и c -направлениях), а проводимость кристаллитов значительно выше проводимости границ, то влияние анизотропии размеров кристаллитов и границ на проводимость поликристалла может превалировать над влиянием текстуры.

Таким образом, полученные выражения, связывающие эффективные параметры поликристалла (σ , теплопроводность) с параметрами кристаллитов, можно использовать для описания свойств аксиально-текстурированных материалов. Однако в ряде случаев для корректного определения эффективных параметров учета влияния текстуры недостаточно и оно должно быть дополнено описанием влияния анизотропии размеров структурных фрагментов поликристалла.

Автор выражает благодарность А. В. Кабышеву и О. П. Мишеву за полезные обсуждения и помощь в работе.

Список литературы

- [1] Landauer R. // First Conf. on Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media A. I. P. Conf. Proc. 1978. N 40. P. 2—11.
- [2] Дыхне А. М. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 1. С. 110—115.
- [3] Балагуров Б. Я. // ЖЭТФ. 1981. Т. 82. № 2. С. 665—671.
- [4] Дрейзин Ю. А., Дыхне А. М. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 5. С. 1756—1760.
- [5] Дрейзин Ю. А., Дыхне А. М., Лисовская Т. Ю. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 244—249.
- [6] Най Дж. Физические свойства кристаллов и их описание тензорами. М.: ИЛ, 1960. 385 с.
- [7] Лопатин В. В., Кабышев А. В. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1989. Т. 25. № 6. С. 942—946.
- [8] Arefiev K. P., Lopatin V. V., Surov Yu. P. // Phys. Stat. Sol. (a). 1986. V. 98. P. K23—K33.
- [9] Арефьев К. П., Боев О. В., Воробьев С. А. и др. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 10. С. 3179—3183.

НИИ высоких напряжений
при Томском политехническом институте

Поступило в Редакцию
13 октября 1989 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1990 г.