

Теплопроводность теллурита висмута

© К.В. Доморацкий, В.М. Ризак*, Л.Я. Садовская

Днепропетровский государственный университет,
49050 Днепропетровск, Украина

* Ужгородский государственный университет,
88000 Ужгород, Украина

E-mail: elf@ff.dsu.dp.ua

(Поступила в Редакцию 23 октября 2001 г.
В окончательной редакции 4 февраля 2002 г.)

Приводятся результаты исследования теплопроводности вдоль трех кристаллографических направлений в кристаллах теллурита висмута. Обнаружено, что теллурид висмута имеет низкую теплопроводность, характерную для стекол и неупорядоченных твердых растворов. При температурах ниже температуры Дебая коэффициенты теплопроводности зависят от температуры как \sqrt{T} , что характерно для неупорядоченных твердых растворов. Проведен расчет температурной зависимости теплопроводности теллурита висмута в рамках модели Дебая.

Теплопроводность непосредственно характеризует ангармонизм колебаний кристаллической решетки. Ее изучение является одним из способов исследования фоновых процессов в кристаллах. В данной работе приведены результаты изучения теплопроводности кристаллов теллурита висмута, информация о которой ранее отсутствовала. Монокристаллы Bi_2TeO_5 выращивались методом Чохральского [1]. При комнатной температуре монокристалл теллурита висмута с параметрами элементарной ячейки $a = 11.602 \text{ \AA}$, $b = 16.461 \text{ \AA}$, $c = 5.523 \text{ \AA}$ обладает ромбической симметрией [2]. Для исследования всех трех коэффициентов теплопроводности был вырезан образец в форме параллелепипеда размером $5 \times 7 \times 9 \text{ mm}$, грани которого соответствовали трем главным кристаллографическим направлениям. Использовался метод стационарного продольного теплового потока. Измерения выполнялись на разработанной в НПО ВНИИФТРИ автоматизированной установке TAU-2 [3] в интервале температур 100–370 К. Программное обеспечение компьютерно-измерительной системы включало в себя операционную систему ИР и программу управления аппаратными модулями DCANN [4].

На рис. 1 представлены измеренные коэффициенты теплопроводности λ_i ($i = 1, 2, 3$) теллурита висмута в интервале температур 100–370 К для трех главных кристаллографических направлений. Все полученные зависимости $\lambda(T)$ в интервале $T < 250 \text{ K}$ подчиняются закону T^{3-n} , где значение $n = 3.5$ меньше, чем в случае рассеяния фононов на точечных дефектах ($n = 4$), и больше, чем для рассеяния на цилиндрических дефектах ($n = 3$) [5]. Низкие абсолютные значения, а также характер температурных зависимостей коэффициентов теплопроводности монокристалла Bi_2TeO_5 ниже 250 К для исследованных направлений согласуются с величинами и поведением коэффициентов теплопроводности для неупорядоченных твердых растворов. В работе [6] указывалось на возможность существования структурного разупорядочения в теллурите висмута, обусловленного случайностью в ориентации неподеленной пары элек-

тронов. Можно предположить, что этот же механизм отвечает и за особенности теплопроводности Bi_2TeO_5 .

При температурах $T > 250 \text{ K}$ теплопроводность монокристалла Bi_2TeO_5 имеет более пологий ход, плавно переходя к участку со слабой зависимостью λ от температуры, который простирается до края исследуемой температурной области. Слабая зависимость теплопроводности от температуры в твердых телах с низкими значениями λ , согласно [7], может определяться сильным ангармонизмом, который обуславливает близость длины свободного пробега фонона l к размерам элементарной ячейки. Это напоминает поведение коэффициентов теплопроводности в аморфных телах, когда длина свободного пробега ограничена средним расстоянием между атомами или молекулами.

Согласно рис. 1, теплопроводность Bi_2TeO_5 имеет малую анизотропию по абсолютной величине, которая практически не зависит от температуры. В структуре теллурита висмута тяжелые атомы металлов занимают узловые позиции кубической флюоритоподобной решетки [2]. Если учесть, что величина l при температурах, превышающих температуру Дебая, соизмерима ($\sim 3 \text{ \AA}$)

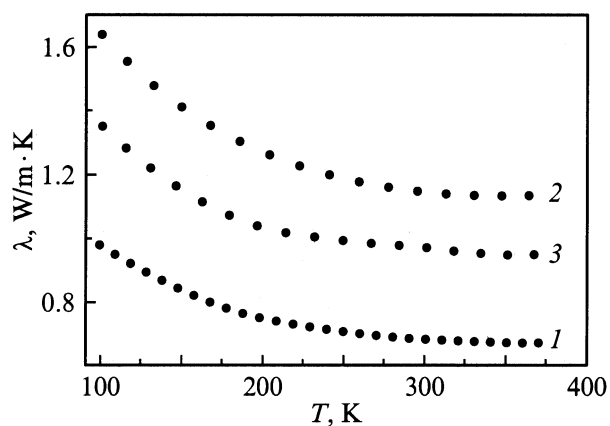


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициентов теплопроводности монокристалла теллурита висмута для кристаллографических направлений [100] (1), [010] (2), [001] (3).

с расстоянием между этими атомами, можно положить, что она изотропна. Согласно данным измерений, приведенных в работе [8], средние значения скоростей распространения упругих волн в направлениях [100], [010] и [001], полученные при учете как продольной, так и поперечных составляющих, равны 2113, 2294 и 2257 м/с соответственно. Таким образом, можно полагать, что анизотропия теплопроводности теллурита висмута определяется в основном анизотропией средних скоростей звука, а ее слабая степень — изотропностью длины свободного пробега фонона.

Для теоретического описания температурного хода теплопроводности на основе соотношения модели Дебая [9]

$$\lambda(T) = \frac{1}{2\pi^2 v} \int_0^{v_{\max}} hv^3 \tau_0 \frac{(hv/kT^2) \exp(hv/kT)}{[\exp(hv/kT) - 1]^2} dv \quad (1)$$

выполнен расчет зависимости $\lambda(T)$. Здесь τ_0 — время релаксации, $v_{\max} = k\Theta_D/h$, Θ_D — температура Дебая (≈ 250 К [10]).

В рассматриваемом приближении время релаксации определялось процессами рассеяния фононов за счет ангармонизма решетки τ_a , рассеяния фононов на дефектах τ_d и границах образца τ_b [9]

$$\tau_0^{-1} = \tau_a^{-1} + \tau_d^{-1} + \tau_b^{-1}. \quad (2)$$

Подобная оценка величин этих времен релаксации фононов дана в [11], где

$$\tau_0^{-1} = D T v^2 \exp(-c/T), \quad (3)$$

D и c — постоянные.

При наличии дефектов τ_d^{-1} можно оценить, используя [12], как

$$\tau_d^{-1} = A v^4, \quad (4)$$

A — постоянная, зависящая от удельного объема, который приходится на один атом в ячейке кристалла, дебаевской скорости звука в кристалле и концентрации дефектов.

При рассеянии фононов на границах кристалла τ_b^{-1} не зависит от температуры [12], т. е.

$$\tau_b^{-1} = B = \text{const}. \quad (5)$$

Используя (1)–(5), получаем

$$\lambda(T) = \frac{1}{2\pi^2 v} \int_0^{v_{\max}} hv^3 \frac{(hv/kT^2) \exp(hv/kT)}{[\exp(hv/kT) - 1]^2} \times \frac{1}{A v^4 + B + D T v^2 \exp(-c/T)} dv, \quad (6)$$

$A = 2.1 \cdot 10^{-40} \text{ s}^3$, $B = 5.1 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$, $C = 0.2 \text{ K}$, $D = 8 \cdot 10^{-18} \text{ s/K}$ — подгоночные параметры.

Теоретически зависимость $\lambda(T)$, полученная в результате численного моделирования с использованием (6), представлена на рис. 2. Как видно из этого рисунка,

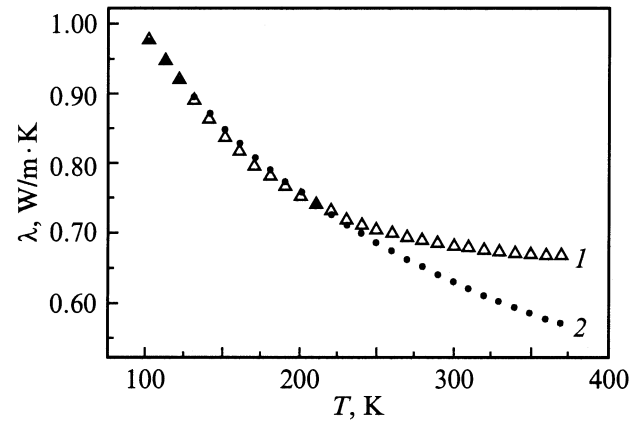


Рис. 2. Экспериментальная (1) и рассчитанная (2) температурные зависимости коэффициента теплопроводности диэлектрического кристалла. Кривая 2 получена согласно (6) с использованием параметров Bi_2TeO_5 в кристаллографическом направлении [100].

рассчитанная кривая совпадает с наблюдаемой экспериментальной зависимостью теплопроводности теллурита висмута при низких температурах. Заметное расхождение обнаруживается в области температур выше 250 К, где измеренный коэффициент теплопроводности слабо зависит от температуры (рис. 2), что может быть обусловлено малой величиной длины свободного пробега коротковолновых акустических фононов по сравнению с размерами элементарной ячейки и свидетельствует об отклонении от чисто фононного механизма передачи тепла [13].

Список литературы

- [1] K.V. Domoratsky, A.Yu. Kudzin, L.Ja. Sadovskaya, G.Ch. Sokolynskii. *Ferroelectrics* **214**, 191 (1998).
- [2] D. Mercurio, M.El. Farissi, B. Frit, P. Goursat. *Mater. Chem. Phys.* **9**, 467 (1983).
- [3] В.В. Свириденко, В.А. Медведев, Н.П. Рыбник, В.Г. Горбунова. *Измер. техника* **5**, 34 (1987).
- [4] К. Острём, Б. Витгенмарк. Система управления с ЭВМ. Мир, М. (1987). 480 с.
- [5] П. Клеменс. В кн.: Динамика решетки / Под ред. У. Мэзона. Мир, М. (1968). С. 244–284.
- [6] К.В. Доморацкий, В.И. Пастухов, А.Ю. Кудзин, Л.Я. Садовская, В.М. Ризак, С.Ю. Стефанович. *ФТТ* **42**, 8, 1404 (2000).
- [7] А.Ф. Иоффе. *ФТТ* **1**, 1, 160 (1959).
- [8] А.М. Antonenko, K.V. Domoratsky, A.Yu. Kudzin, L.Ya. Sadovskaya. *Cond. Matt. Phys.* **2**, 4, 721 (1999).
- [9] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1979). 286 с.
- [10] К.В. Доморацкий, В.М. Ризак, Л.Я. Садовская, В.А. Стефанович. *ФТТ* **41**, 4, 629 (1999).
- [11] В.И. Альтухов. Автореф. докт. дис. Чеч.-Инг. ун-т (1982).
- [12] И.М. Ризак, В.М. Ризак, С.И. Перечинский, М.И. Гурзан, С.М. Гасинец, В.Ю. Сливка. Тез. докл. XII конф. по физике сегнетоэлектриков. Тверь (1992). Т. 1. С. 26.
- [13] В.М. Ризак. Докт. дис. Ужгород (1996). 392 с.