

Моделирование тепловых и электрических свойств сегнетоэлектрических и полупроводниковых материалов твердотельной электроники

Казаров Бениамин Агонович¹

аспирант

Пятигорский государственный технологический университет, Пятигорск, Россия

E-mail: kazarovbeniamin@mail.ru

Тема исследования связана с важной проблемой физики конденсированных сред – изучением особенностей тепловых, электрических и транспортных свойств сегнетоэлектрических (эластических) кристаллов, пленок, твердых растворов карбида кремния и структур на их основе. Эти материалы обладают важными физическими характеристиками, определяющими их использование в качестве активных элементов различных устройств твердотельной микроэлектроники. На основе формулы типа Кубо-Гринвуда получены выражения для расчета кинетических коэффициентов (теплопроводности, проводимости) сегнетоэлектрических (эластических) кристаллов (KN_2PO_4 , Hg_2Cl_2 , ТГС), легированных кристаллов ZnSe и твердых растворов карбида кремния $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$.

В простой модели с дебаевским спектром частот, кривую теплопроводности $K(T)$ кристалла с фазовым переходом можно представить в виде:

$$K(T) = \alpha \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \cdot \int_0^1 \frac{x^4 e^{\frac{x\theta}{T}}}{\left(e^{\frac{x\theta}{T}} - 1 \right)^2} \gamma(x) dx, \quad (1)$$

где α – коэффициент при интеграле теплопроводности, θ – характеристическая температура кристалла (температура Дебая), $\gamma(x)$ – сумма обратных времен релаксации, обусловленных рассеянием фононов в исходном («идеальном») кристалле, за счет механизмов структурного фазового перехода, дефектов и их комплексов. Выражение для $\gamma(x)$ определяет возможные механизмы (каналы) рассеяния фононов и его, согласно правилу Маттиссена, можно представить в виде:

$$\gamma(x) = \gamma_o(x) + \gamma_c(x) + \gamma_d(x) + \gamma_k(x). \quad (2)$$

Таким образом, предложено модельное описание рассеяния фононов на точечных дефектах кристаллической решетки, на их комплексах, кластерах-наноструктурах и в целом развит подход к анализу влияния дефектов, кластеров (доменов), наночастиц на критическое поведение теплопроводности кристаллов около T_c на микроскопическом уровне.

В работе разработаны модели механизмов проводимости в твердых растворах $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$, а также показана возможность возникновения в этих системах фазового перехода изолятор-металл. Построена модель эффекта усиления диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь на низких частотах в твердых растворах $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$.

В заключение отметим, что при сравнении результатов расчета с экспериментами не все параметры модели удается согласовать с известными данными для растворов $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$. Вместе с тем, в работе достигнуто качественное вполне приемлемое соответствие теории и эксперимента, которое имеет место для всех проведенных расчетов.

¹ Автор выражает благодарность научному руководителю д.физ-мат.н., профессору Алтухову В.И. за помощь в подготовке тезисов.