

**ВЛИЯНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА ДИСПРОЗИЯ НА
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ TlInSe_2
Нуруллаев Ю.Г.¹, Бархалов Б.Ш.², Гахраманов Н.Ф.³, Сардарова Н.С.⁴,
Вердиева Н.А.⁵, Гасымзаде Т.М.⁶ Email: Nurullayev1163@scientifictext.ru**

¹Нуруллаев Юсиф Гушу оглу - доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра общей физики и методики преподавания физики,
Бакинский государственный университет, г. Баку,
кафедра физики твердого тела и полупроводников,
Сумгаитский государственный университет, г. Сумгаит;

²Бархалов Бархал Шабан оглу - доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник,
лаборатория твердотельной электроники,
Институт физики

Национальная академия наук Азербайджана, г. Баку,
кафедра физики твердого тела и полупроводников,
Сумгаитский государственный университет, г. Сумгаит;

³Гахраманов Надир Фаррух оглу – доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра общей физики,
Бакинский государственный университет, г. Баку;

⁴Сардарова Наиля Сохраб гызы - кандидат физико-математических наук, доцент,
кафедра физики твердого тела и полупроводников,
Сумгаитский государственный университет, г. Сумгаит;

⁵Вердиева Нурана Алишер гызы – докторант,
Гянджинский государственный университет, г. Гянджа;

⁶Гасымзаде Томриз Мамед гызы – магистр,
кафедра общей физики и методики преподавания физики,
Бакинский государственный университет, г. Баку,
Азербайджанская Республика

Аннотация: в последнее время, наряду с узкозонными простыми веществами, были детально изучены различные структуры, созданные на основе комбинации соединений типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ с широкой запрещенной зоной. Одним из материалов, который стал предметом обширных исследований в настоящее время, являются полупроводниковые соединения типа $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ (A -Tl; B - Ga, In; C -S, Se, Te), которые имеют слоистую и цепочечную структуру. В этих соединениях химические связи и электронные свойства определяются неспаренными электронами. Эти материалы представляют собой кристаллы с дефектной структурой и очень чувствительны к ультрафиолетовым, видимым, инфракрасным, рентгеновским и γ -лучам. Установлено, что теплопроводность этих кристаллов зависит от количества добавленных в их состав сторонних атомов.

Ключевые слова: слоистые и цепочечные структуры, химические связи, электронные свойства, эффект памяти и переключения, теплопроводность, γ – квант.

**EFFECT OF RARE-EARTH ELEMENT DYSPROSIUM ON THE HEAT
CONDUCTIVITY OF TlInSe_2 SOLID SOLUTION CRYSTALS**

**Nurullayev Yu.G.¹, Barkhalov B.Sh.², Gahramanov N.F.³, Sardarova N.S.⁴,
Verdiyeva N.A.⁵,
Gasimzadeh T.M.⁶**

¹Nurullayev Yusif Gushu oğly - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,
DEPARTMENT OF GENERAL PHYSICS AND METHODS OF TEACHING PHYSICS,
BAKU STATE UNIVERSITY, BAKU;

DEPARTMENT OF SOLID STATE AND SEMICONDUCTOR PHYSICS,
SUMGAI STATE UNIVERSITY, SUMGAI;

²Barkhalov Barkhal Shaban oğly - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Chief Researcher
LABORATORY OF SOLID STATE ELECTRONICS,
INSTITUTE OF PHYSICS,

NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF AZERBAIJAN, BAKU,
DEPARTMENT OF SOLID STATE AND SEMICONDUCTOR PHYSICS,
SUMGAI STATE UNIVERSITY, SUMGAI;

³Gahramanov Nadir Farruh oğly - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,
DEPARTMENT OF GENERAL PHYSICS AND METHODS OF TEACHING PHYSICS,
BAKU STATE UNIVERSITY, BAKU;

⁴Sardarova Naila Sohrab gızı - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate-Professor,

Abstract: lately along with narrow-band simple substances, have been studied in detail various structures created on the basis of a combination of $A^{III}B^V$ and $A^{II}B^{VI}$ compounds with a wide band-gap. One of the materials that has become the subject of extensive research at present is semiconductor compounds of the $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ type ($A - Tl; B - Ga, In; C - S, Se, Te$), which have layered and chain structure. In these compounds, chemical bonds and electronic properties are determined by unpaired electrons. These materials are crystals with a defective structure and are very sensitive to ultraviolet, visible, infrared, x-rays and γ -rays. It was established that the thermal conductivity of these crystals depends on the number of external atoms added to their composition.

Keywords: layered and chain structures, chemical bonds, electronic properties, memory and switching effect, thermal conductivity, γ – quanta.

УДК 548.5

В настоящего время теплопроводность полупроводников привлекает внимание большого числа исследователей, что обусловлено с одной стороны большим теоретическим значением этого явления, с другой стороны техническим применением с различных приборах и устройствах. Исследование теплофизических свойств способствует более глубокому пониманию ряда процессов, протекающих в полупроводниках и связанных с движением и рассеянием фононов, электронов и дырок. Понимание механизмов электрических, оптических, тепловых и других физических свойств твердого тела часто основывается на представленных о зонной структуре. Зонная теория позволяет наглядно представить себе возбуждение и поведение носителей тока в твердом теле. Так как современные представления о переносе тепла носителями основываются на взаимодействиях их между собой и дефектами кристаллической решетки [1, 2].

Среди широко исследуемых в последнее время полупроводниковых кристаллов особое место занимают слоистые и цепочные полупроводники $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ присущей им сильной анизотропией физических свойств вдоль различных кристаллографических направлений.

Одним из соединений, относящихся к классу соединений типа $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ и обладающих интересными свойствами и имеющих практическое значение являются кристаллы твердого раствора $TlInSe_2$.

В настоящей работе изучена теплопроводность монокристалла $TlInSe_2$ с редкоземельным элементом диспрозием (Dy) в температурном интервале 80-600 К перпендикулярно к слоям. Монокристаллы соединений $TlInSe_2$ выращивались методом Бриджмен-Стокбаргера. Образцы $TlInSe_2$ и $TlIn_{1-x}Dy_xSe_2$ имели форму параллелепипеда размерами 10 x 10 x 3.0 мм. Контакты к кристаллам создавали в напылении серебра в вакууме на установке типа ВУП-4.

В кристалле твердого раствора $TlIn_{1-x}Dy_xSe_2$ ($x; 0,01; 0,03; 0,05$) между энергии активации и параметрами решетки имеется определенная корреляция. Увеличение ширины запрещенной зоны твердых растворов при замещении атомов индия атомами диспрозия в $TlInSe_2$ связано с смещением валентной зоны в область более высоких энергий. Для $TlInSe_2$ и $TlIn_{1-x}Dy_xSe_2$ наблюдается характерный полупроводниковый ход проводимости. Образцы имели проводимость p -типа во всем измеренном интервале температур. Теплопроводность исследуемых полупроводников измерялась стационарным методом.

Было установлено, что кристалл $TlInSe_2$ обладает сильными анизотропными свойствами. Результаты, полученные для температурной зависимости коэффициента теплопроводности в направлении перпендикулярно слоям для $TlInSe_2$, приведены на рис. 1.

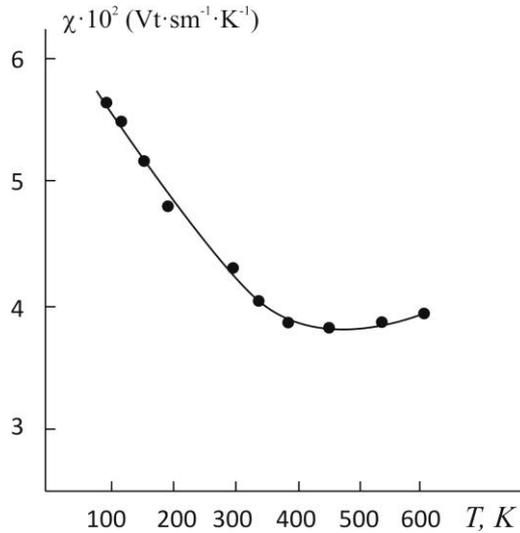


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности монокристалла $TlInSe_2$

Установлено, что коэффициент теплопроводности для кристаллов твердого раствора $TlInSe_2$ в широком интервале температур изменяется по закону $\chi \approx T^{-1}$. Такая температурная зависимость коэффициента теплопроводности подтверждает наличие трехфононного процесса рассеяния в зависимости от температуры в кристалле, исследованном при теплообмене [3-5].

Полученные нами экспериментальные результаты проанализированы и рассчитаны соответствующие параметры для кристалла $TlInSe_2$. С учетом того, что средняя молекулярная масса для кристалла твердого раствора $TlInSe_2$ составляет $M = \frac{M_{Tl} + M_{In} + 2M_{Se}}{2} = 236,6 \cdot \frac{г}{моль}$, температура Дебая равна $\theta = 245 K$, $\delta = 3,8 \cdot 10^{-8} см$, $N=8$ для исследуемого образца, из соответствующих теоретических расчетов для комнатной температуры получается значение $\chi_p \cdot T = 12,02 \frac{Вт}{см}$, тогда как основанное на экспериментальных результатах значение составляет $\chi_{p, экп.} \cdot T = 7,72 \frac{Вт}{см}$.

Исследования показали, что теоретические расчеты и экспериментальные результаты совпадают по порядку и отличаются незначительно. В целом, во всех случаях невозможно сказать, что коэффициент теплопроводности в области температур Дебая является линейным. Только для некоторых кристаллов такая зависимость наблюдается при относительно низких температурах. Одной из причин того, почему тепловое сопротивление отклоняется от линейной температурной зависимости, может быть рост возбуждения оптических фононов с изменением температуры. В этом случае повышается роль оптических фононов в переносе тепловой энергии и в теплопроводности проявляются дополнительные механизмы для теплопроводности. В этом случае рассеяние акустических и оптических фононов от узлов кристаллической решетки растет.

Температуру Дебая можно рассчитать из следующего соотношения, предложенного Линдеманом [1]

$$\theta = C_L \cdot T_{er}^{1/2} M^{-5/6} \cdot \rho^{1/2}, \quad (1)$$

где C_L - постоянная, зависящая от типа кристаллической структуры и определяется как:

$$C_L = \sqrt{\frac{6\pi^2 N A^{5/2} T_{er}^{3/3}}{\Omega_0 \rho}} \cdot \frac{h}{2\pi k} \cdot v_0 \quad (2)$$

В этом выражении единственная величина, которая зависит от скорости распространения звука в кристалле - v_0 , в зависимости от направления относительно кристаллографической оси кристалла. В литературе [1, 6] в соответствии со скоростью распространения звука в направлении вдоль слоев и перпендикулярно к ним $v_{11} = 1,33 \frac{см}{с}$ и $v_{\perp} = 2,92 \frac{см}{с}$, соответственно, получаются значения $(C_L)_{\perp} = 60,6$ и $(C_L)_{11} = 133,5$.

Из теоретических расчетов для комнатной температуры в направлении параллельно слоям получается значение $\chi_p \cdot T = 7,5 \text{ Bm}/\text{см}$. Полученные выше значения находятся в хорошем соответствии с литературными данными [1].

Исследования показали, что редкоземельный элемент Dy, добавленный в кристалл твердого раствора TlInSe_2 влияет как на численное значение, так и на температурную зависимость коэффициента теплопроводности. Установлено, что в исследуемом кристалле твердого раствора электронная теплопроводность пренебрежимо мала и тепло переносится в основном фононами.

На рис. 2 приведены температурные зависимости коэффициента теплопроводности при 80-600 К для кристаллов твердых растворов $\text{TlIn}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Se}_2$ (x : 0,01; 0,03; 0,05) в направлении перпендикулярно слоям.

Для всех кристаллов коэффициент теплопроводности уменьшается с ростом температуры. Уменьшение теплопроводности с ростом температуры в интервале температур 80-400 К происходит по закону $\chi \approx T^{-1}$, затем уменьшение ослабляется. Такая температурная зависимость теплопроводности соответствует процессу трехфононного рассеяния в кристалле.

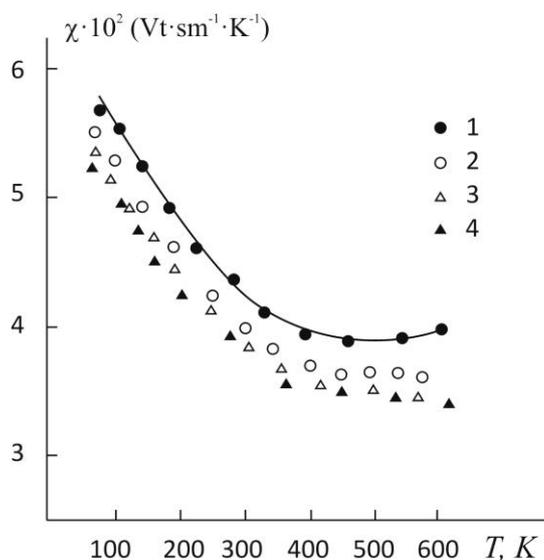


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности монокристалла твердого раствора $\text{TlIn}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Se}_2$ (x : 1- 0; 2- 0,01; 3 – 0,03; 4 – 0,05)

Следует отметить, что температурная зависимость теплопроводности кристалла твердого раствора TlInSe_2 с различным процентным содержанием редкоземельных элементов (Dy) характерна для кристаллов кристаллизующихся в структурном типе TlS. Из рисунков 1 и 2 видно, что коэффициенты теплопроводности твердых растворов $\text{TlIn}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Se}_2$ ниже, чем у исходного материала TlInSe_2 . Когда ионы In заменяются ионами Dy общий коэффициент теплопроводности кристалла уменьшается. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности, а также его численное значение дополнительно подтверждают перенос тепловой энергии фононами кристаллической решетки в исследованных кристаллах. При этом вычисления значения электронной компоненты теплопроводности показали, она пренебрежимо мала ($\chi_{эл} \approx 10^{-7} \text{ Bm}/\text{см} \cdot \text{K}$).

Список литературы / References

1. Керимова Э.М. Кристаллофизика низкоразмерных халькогенидов. Баку: Элм, 2012. 708 с.
2. Мадатов Р.С., Наджафов А.И., Мамедов М.А., Мамедов В.С. Электрические свойства соединения TlInS_2 гексагональной модификации // Известия НАНА. Сер. физ.-мат. и техн. наук, 2005. № 2. С. 120-123.
3. Чудновский А.В., Могилевский Е.В. Теплопроводность полупроводников. М.:Наука, 1992. 603 с.
4. Сардарова Н.С., Бархалов Б.Ш., Нуруллаев Ю.Г., Вердиева Н.А., Джафаров М.Б. Электрические свойства кристаллов твердых растворов $\text{TlInS}_2\text{-TlEuS}_2$ различного состава // Наука, техника и образование, 2016. № 11 (29). С. 6-9.
5. Leibfried G., Naasen P. Zum mechanismus der plastischen verformung // J. Phys., 1991. V. 137. № 1. P. 67.
6. Зарбалиев М.М. Теплопроводность твердых растворов системы $\text{TlInTe}_2 - \text{TlNdTe}_2$ // Физика, 1997. Т. 3. № 4. С. 35-38.