РАЗДЕЛ XIII. ФИЗИКА

Гусейнов Д.И.о., Адгезалова Х.А.к., Гасанов О.М.

Зависимость теплопроводности от состава в сплаве $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$

АГПУ

(Азербайджан, Баку)

doi: 10.18411/lj-04-2021-79

Аннотация

В твердых растворах $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$ тепловое сопротивление возникает в основном с рассеянием на фонон-фононах, а по мере увеличения количества Ln в составе сплава значение теплового сопротивления увеличивается из-за точечных дефектов и парамагнитных центров. Экспериментальные результаты теплопроводности в твердых растворах $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$ показывают, что теплопроводность меньше значений, полученных из расчетов, в основном из-за влияния нормальных процессов на теплоперенос. При низких температурах, эксперимент хорошо согласуется с теорией.

Ключевые слова: твердые растворы, тепловое сопротивление, точечные дефекты, теплопроводность, теплоперенос

Abstract

In $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$ solid solutions, thermal resistance arises mainly with scattering by phonon-phonons, and as the amount of Ln in the alloy increases, the value of thermal resistance increases due to point defects and paramagnetic centers. Experimental results of thermal conductivity in solid solutions $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$ show that thermal conductivity is lower than the values obtained from calculations, mainly due to the influence of normal processes on heat transfer. At low temperatures, the experiment is in good agreement with theory.

Key words: solid solutions, thermal resistance, point defects, thermal conductivity, heat transfer

Не смотря на то что явления переноса в сплавах системы $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$ были частично изучены, существует серьезная потребность в изучении теплопроводности в широком диапазоне температур, чтобы полностью понять природу механизмов рассеяния носителей заряда и теплоносителей в этих сплавах.

В квазибинарных сечениях $(\text{SnSe})_{1-x}-(\text{LnSe})_x$, из областей твердого раствора, изучены в широком диапазоне температур механизмы переноса заряда и теплопередачи для ряда x-концентраций соединений и проанализированы общие закономерности.

В целом можно сказать, что уменьшение общей теплопроводности системы в основном связано с рассеянием фононов на нерегулярных структурах сплавов и других дефектах.

Фононы могут рассеиваться на произвольных дефектах, вызывающих на локальных изменениях межатомной силы и плотности. Поскольку учесть изменение величины силы межатомной упругости достаточно сложно, то обычно достаточно учитывать рассеяние фононов от локальных изменений плотности.

Этот вопрос рассматривался Амбегаокаром [5] и Клеменсом [6]. В этих работах, с учетом рассеяния фононов на точечных дефектах и преброс-процессов при температурах $T > \theta_D$ в неидеальных кристаллах коэффициент теплопроводности был определен выражением

$$\chi_f = \frac{k_0}{2\hbar^2 B} \int_0^\omega \frac{d\omega}{1 + (A/B)\omega^2}$$

где χ_i – теплопроводность твердых растворов при отсутствии дефектов, $\omega_D = \theta_D \frac{k}{\hbar}$ – частота дебзевского фононов, ω_0 – частота, при которой релаксационные значения процесса рассеяния и рассеяния на дефектах равны, N – количество атомов в единице объема, Γ – параметр нерегулярности

$$\Gamma = x(1-x) \left[\left(\frac{\Delta M}{M} \right)^2 + \varepsilon \left(\frac{\Delta \delta}{\delta} \right)^2 \right] \quad (6)$$

Рисунок. Зависимость теплопроводности от состава в сплаве $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$: а) 1-экспериментальные значения, 2 и 3 вычисляется по формуле; б) $\text{Er}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Se}$ $T=300\text{K}$ 1- без дефекта, 2 и 3 вычисляется по формуле; в) $\text{Er}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Se}$ $T=300\text{K}$; 1- без дефекта, 2 и 3 вычисляется по формуле ,

Учитывает влияние локальных изменений плотности и упругих свойств, где x – относительная концентрация примеси, ε – характеризует упругие свойства окружающей среды, $\frac{\Delta M}{M}$ – относительное изменение массы при замене основного

атома примесным атомом ($\Delta M = \bar{M}_{es} - \bar{M}_{as}$), $\frac{\Delta\delta}{\delta}$ - локальное изменение постоянной решетки в результате замены. $\frac{\Delta\delta}{\delta}$ - может быть рассчитан из основных и примесных параметров элементарной клетки [4].

$$\frac{\Delta\delta}{\delta} = \frac{a_{as} - a_{es}}{a_{es}} \cdot \frac{\mu}{\mu + 1}$$

$$\mu = \frac{1 + \nu}{2(1 - 2\nu)}, \quad \nu - \text{коэффициент Пуассона}, \quad \nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}, \quad c_{11} \text{ и } c_{12} \text{ постоянные}$$

упругости.

Из систем, которые мы исследовали, было определено, что фононы должны рассеиваться в основном за счет локальных изменений плотности, поскольку изменение молекулярной массы и параметров элементарной ячейки мало при переходе от SnSe к твердым растворам на его основе. Второе слагаемое можно не учитывать. В этом случае параметр неоднородности рассчитывается по упрощенной формуле.

$$\Gamma = \frac{x(1-x)}{\left(\frac{\Delta M}{M}\right)^2}$$

Оценивания Γ , N число атомов в единице объема $N = \frac{\alpha_{qef}}{\bar{M}} = \frac{\alpha z}{\Omega_0}$, где z - единица формальной единицы, α - число атомов в них, $\Omega_0 = abc$ ядро орторомбического объема.

$$\frac{\chi_f}{\chi_i} = \frac{\omega_0}{\omega_D} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\left(\frac{\omega_D}{\omega_0}\right)^{2n+1}}{2^{n+1}}$$

Рассчитанная по этой формуле значение $\frac{\chi_f}{\chi_i}$, совершенно не согласуется с экспериментальными результатами для соответствующих фаз, что позволяет говорить о реалистичности приведенных выше соображений для радикальной замены $(\text{SnSe})_{1-x}(\text{LnSe})_x$. Экспериментальные результаты меньше оценок, полученных из расчетов. Можно предположить, что такое различие связано с влиянием нормальных процессов (n-процессов) на процесс теплопереноса.

Известно, что N-процесс, который происходит с сохранением полного импульса, не может обеспечить прямое тепловое сопротивление при первичном приближении. Однако нормальные процессы - это взаимодействия фонон-фононного типа. В результате этих двух взаимодействий образуется третий фонон, который не может покинуть первую зону Брьюлиена, т.е. не участвует в prebros -процессе. Однако этот образующийся фонон имеет способность участвовать в prebros -процессе, создавая тепловое сопротивление. Таким образом, N-процессы приводят к перераспределению импульса между фононами.

Было интерпретировано на основе теории Клеменса для экспериментальных результатов $T < \theta_D$ при 90K. Согласно этой теории, термосопротивление из-за точечных дефектов определяется по формуле

$$\omega_i = \frac{\hbar^2 x(1-x)(M_{\text{SnSe}} - M_{\text{LnSe}})^2}{0,9 N \hbar v^2 \bar{M}^2}.$$

где

$$\frac{1}{\chi_f} = \frac{1}{\chi_u} + \frac{1}{\chi_N} + \frac{1}{\chi_i}.$$

Расчеты показывают, что даже небольшое количество ω_i в сплавах SnSe ω_u намного больше, что приводит к резкому снижению χ_f . Результаты расчета и в так же экспериментов $\chi_f(x)$ показаны на рисунке. Как видно, при низких температурах, эксперимент хорошо согласуется с теорией. Таким образом, нормальные процессы рассеяния фононов в системах сплава $(SnSe)_{1-x}(LnSe)_x$ при низких температурах, начиная с комнатной температуры, в равной степени участвуют в преобладании процессов, а рассеянии на точечных дефектах (от структурных дефектов сплавов и других дефектов) превосходят фонон-фононные процессы.

1. Kumar N., Parihar U., Kumar R., Patel K. J., Panchal C. J., Padha N. Effect of Film Thickness on Optical Properties of Tin Selenide Thin Films Prepared by Thermal Evaporation for Photovoltaic Applications // American Journal of Materials Science 2012, 2(1): 41-45
2. The electronic spectrum of SnSe // Chemical Physics Letters 418 (2006) 189–195
3. Гусейнов Д.И., Мургузов М.И., Исмаилов Ш.С. Теплопроводность твердых растворов $Er_xSn_{1-x}Se$ ($x < 0.025$) // Изв. АН России. Неорг. материалы. 2008. Т.44. № 5. с. 542-544.
4. Алиев И.И., Гусейнов Дж.И., Мургузов М.И., Исмаилов Ш.С., Годжаев Э.М. Диаграмма состояния и свойства сплавов системы SnSe–DySe // «Неорганические материалы» Известия АН России, 50, 259 (2014).
5. Смирнов И.А., Тamarченко В.И. «Электронная теплопроводность в металлах и полупроводниках» Л. Наука. 1977. 152с.
6. Драбл Дж. Голдсмит Г. Теплопроводность полупроводников. М. Изд-во Иностран. Лит. 1963. 266с.
7. Клеменс Л. «Теплопроводность твердых тел при низких температурах». М. Изд-во иностран. Лит., 1959. с.224-314.

**Кильдишева В.А., Великанов И.С., Андреев А.А., Щипцов Р.А., Хайрушев И.В.,
Сергеева Б.В.**

**Синтез композитных структур с наночастицами магнетита, включенными в
микрочастицы карбоната кальция**

*Саратовский национальный исследовательский университет имени Н.Г.
Чернышевского
(Россия, Саратов)*

doi: 10.18411/lj-04-2021-80

*Научный руководитель
Сергеев С.А.*

Аннотация

Рассмотрены области применения композитов. Изучены особенности структуры композитных материалов. Изучен синтез микрочастиц карбоната кальция. Синтезированы микрочастицы карбоната кальция, модифицированные наночастицами магнетита, на нановолокнах поликапролактона. Проведено исследование свойств полученных микрочастиц.

Ключевые слова: метод электроформования, композитные нетканые материалы, органические нановолокна, наночастицы, СВЧ излучение

Abstract

The areas of application of composites are considered. The structures of composite materials have been studied. The synthesis of microparticles of calcium carbonate has been studied. Microparticles of calcium carbonate, modified nanoparticles of magnetite, on polycaprolactone nanofibers have been synthesized. The study of the properties of the obtained microparticles was carried out.

Key words: electrospinning, composite nonwoven materials, organic nanofibers, nanoparticles, microwave radiation