

# Высокорезистивные материалы

Раджабов Евгений Александрович

Лекция 8

# Решение задач - 2

1. Установить соответствие экспериментального пика диэлектрических потерь и пика рассчитанного по теории Дебая
2. Вычисление энергии активации по температурной зависимости пика диэлектрических потерь
2. Определение параметров пика термодеполяризации

# соответствие экспериментального пика диэлектрических потерь и пика по теории Дебая



Он предложил модель твёрдого тела, на основе которой объяснил поведение удельной теплоёмкости при низких температурах; характерная температура, ниже которой существенное значение приобретают квантовые эффекты, получила название температуры Дебая.

Он теоретически описал влияние тепловых колебаний кристаллической решётки на дифракцию рентгеновских лучей (фактор Дебая — Валлера), совместно с Паулем Шеррером разработал порошковый метод рентгеноструктурного анализа и использовал методы рентгеновского рассеяния для исследования структуры жидкостей и отдельных молекул.

Дебай впервые наблюдал дифракцию света на ультразвуке и использовал метод рассеяния света для исследования структуры молекул (в том числе полимеров) и критических явлений.

Он развил дипольную теорию диэлектриков, на основе которой объяснил их дисперсионные свойства и некоторые аспекты межмолекулярных взаимодействий. **Подход Дебая стал базовым для анализа процессов релаксации в различных типах сред**

Совместно с Эрихом Хюккелем он разработал теорию слабых растворов сильных электролитов, на основе которой объяснил зависимость коэффициентов активности и проводимости от концентрации.

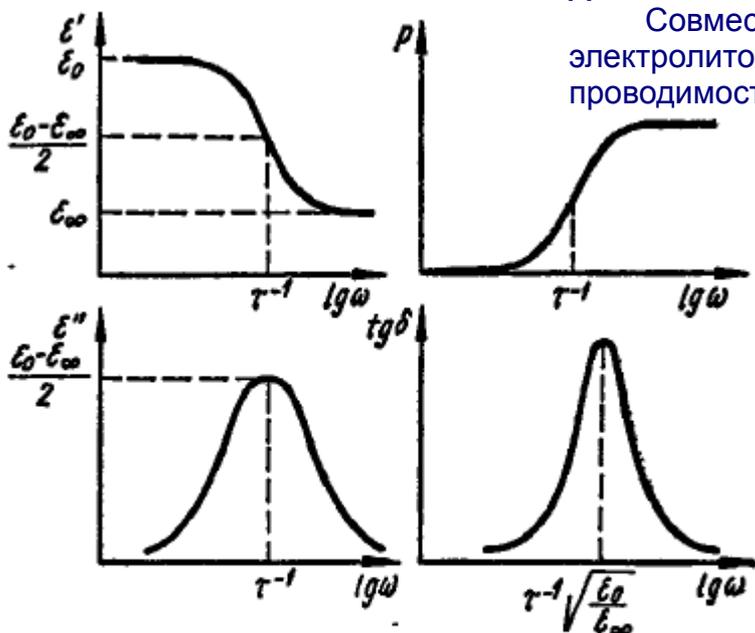


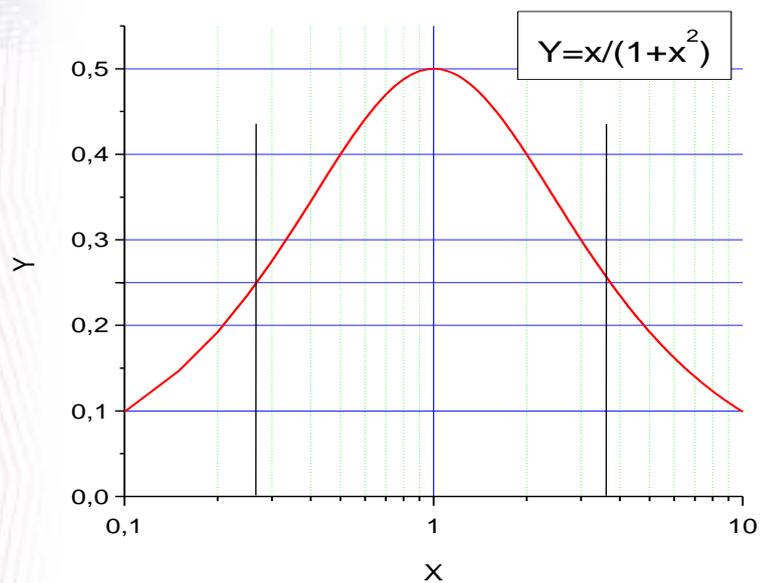
Рис. 8.6. Дисперсия диэлектрической проницаемости в диэлектриках с тепловыми механизмами поляризации.

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad \epsilon'' = \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}.$$

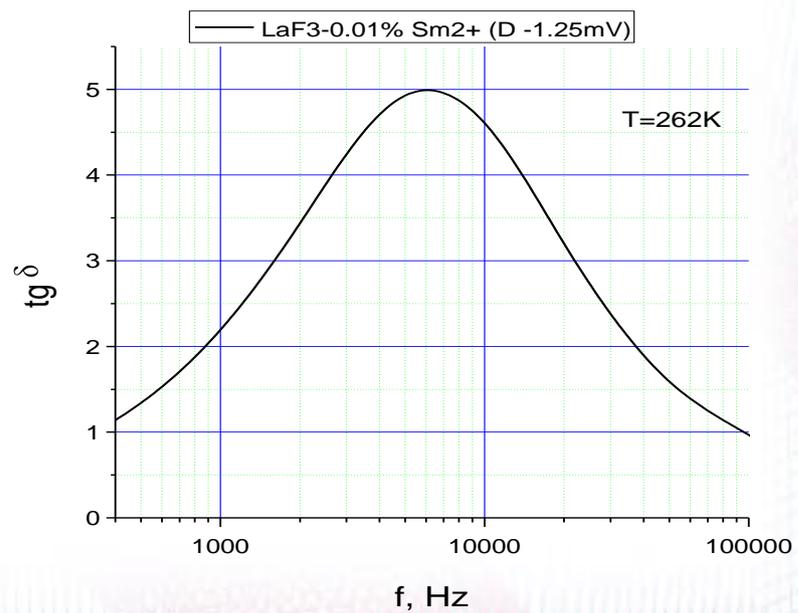
$$\operatorname{tg} \delta = \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) \omega \tau}{\epsilon_0 + \epsilon_{\infty} \omega^2 \tau^2}, \quad \operatorname{tg} \delta_{\text{Debye}} = C \frac{\omega \tau}{1 + (\omega \tau)^2}$$

здесь  $\epsilon_0$  — низкочастотная диэл. проницаемость а  $\epsilon_{\infty}$  — высокочастотная (теория П. Дебая)

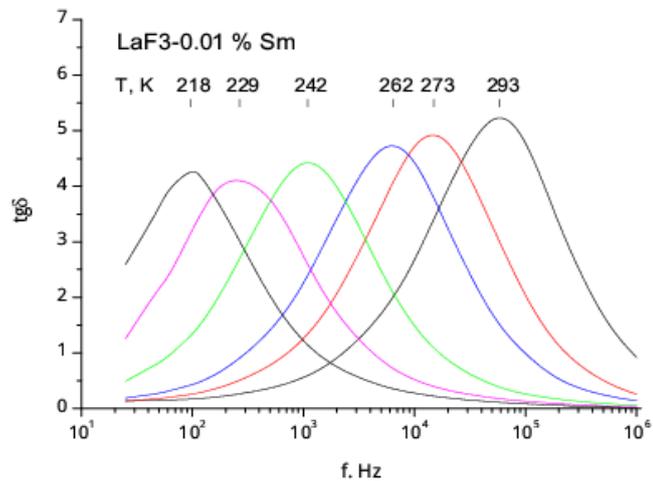
# Пик по теории Дебая



$$\operatorname{tg} \delta_{\text{Debye}} = C \frac{\omega \tau}{1 + (\omega \tau)^2}$$



## 2. Вычисление энергии активации по температурной зависимости пика диэлектрических потерь

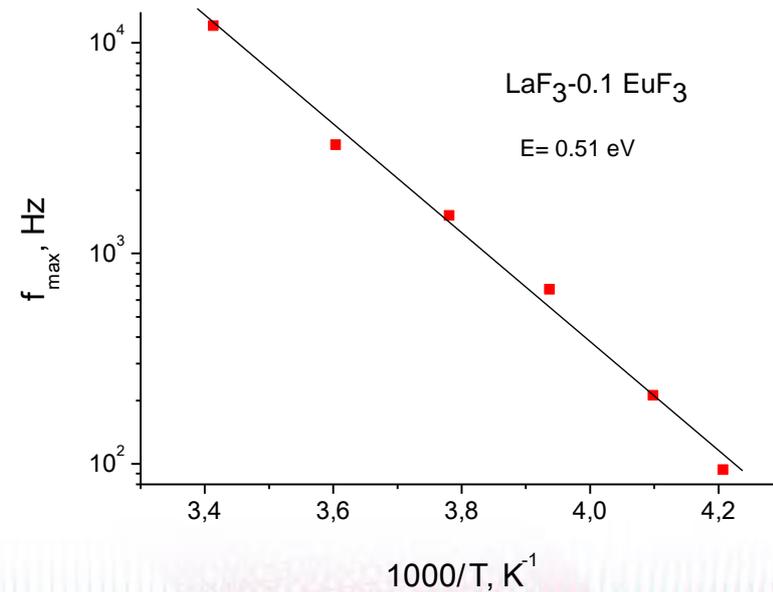


$$\tau(T) = \tau_0 \exp(E/kT),$$

$$f_{\max} = f_0 \exp(-E/kT)$$

$$k = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/град}$$

$$\ln(f_{\max}) = A - E/kT$$



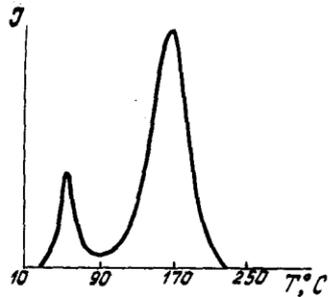


Рис. 5.5. Кривая термовысвечивания кристалла NaCl-Ni.

При теоретическом исследовании кривой термовысвечивания, обусловленной одним типом ловушек, обычно предполагается осуществление одного из двух основных типов кинетики люминесценции: кинетика первого порядка или кинетика второго порядка. Под кинетикой первого порядка (иногда такой тип кинетики называется мономолекулярным) подразумевается кинетика, описываемая уравнением вида (4.25) (при  $\beta n \gg \delta_2$ ):

$$\frac{dn}{dt} = -w_1 n. \quad (5.11)$$

Так как при термовысвечивании происходит нагревание фосфора, то в уравнении (5.11) перейдем от переменной  $t$  к переменной  $T$ , для чего воспользуемся соотношением (5.10), тогда, учитывая, что  $w_1 = w_{10} e^{-E_1/kT}$ , получим

$$\frac{dn}{dT} = -c^{-1} w_{10} e^{-E_1/kT} n. \quad (5.12)$$

Интегрируя (5.12) в пределах от  $T_0$  до  $T$  (полагаем  $n = n_0$  при  $T = T_0$ , переменную под знаком интеграла обозначаем  $T'$ ), находим, что

$$n = n_0 \exp\left[-\frac{w_{10}}{c} \int_{T_0}^T \exp(-E_1/kT') dT'\right]. \quad (5.13)$$

Выражение (5.13) показывает, как изменяется запасенная светосумма при нагревании фосфора от температуры  $T_0$  до  $T$ . Мы найдем, как изменяется при этом  $J$ , если учтем, что

$$J = w_1 n = w_{10} e^{-E_1/kT} n, \quad (5.14)$$

и подставим сюда вместо  $n$  выражение (5.13):

$$J = w_{10} n_0 \exp(-E_1/kT) \exp\left[-\frac{w_{10}}{c} \int_{T_0}^T \exp(-E_1/kT') dT'\right]. \quad (5.15)$$

Это и есть уравнение кривой термовысвечивания в случае кинетики первого порядка, если в кристалле имеется один сорт ловушек, глубина которых равна  $E_1$ .

Второй рассмотренный в § 4.3 случай при  $\delta_2 \gg \beta n$ , описываемый уравнением (4.29)

## Метод термовысвечивания, термодеполяризации

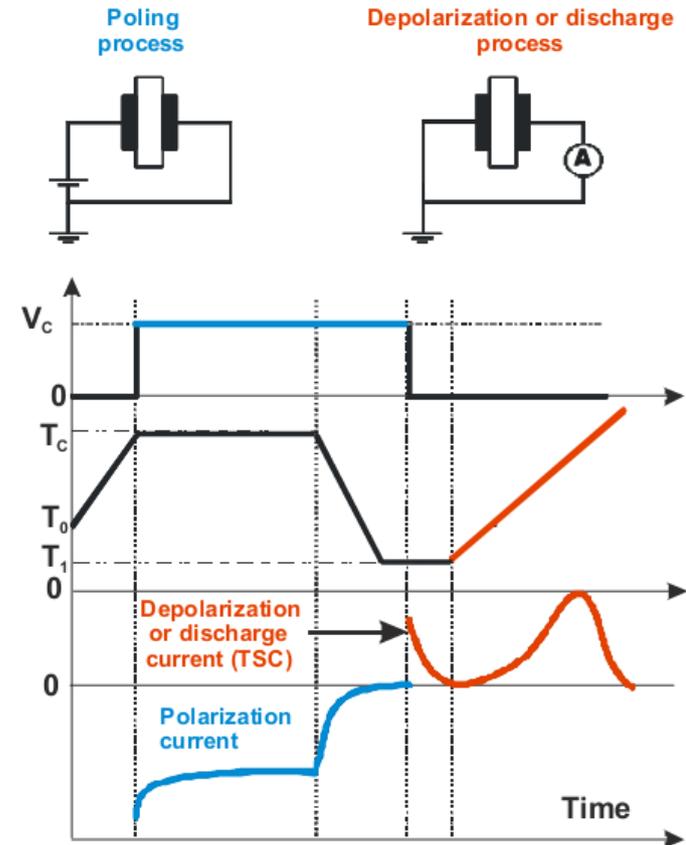


Figure 6.1. The thermally stimulated currents (TSC) method

### 3. Определение параметров пика термодеполяризации

$$I(T) = c_0/\tau_0 \exp(-E/kT) \exp[-1/b\tau_0 \times \int_0^T \exp(-E/kT') dT'],$$

Упрощенные формулы

$$E = C_u \cdot kT_m$$

$C_u$  - конст Урбаха (=29)

$$E = kT_m^2 / (T_m - T_1)$$

$$E = 2kT_m / (1.25T_m / (T_2 - T_1) - 1)$$

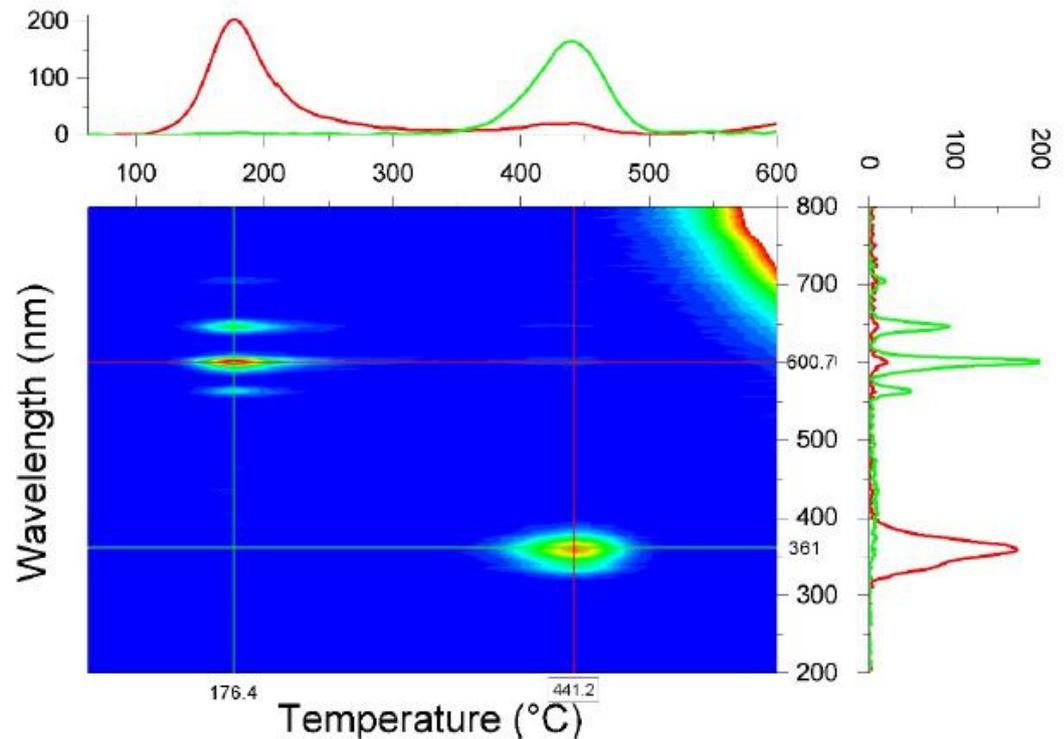
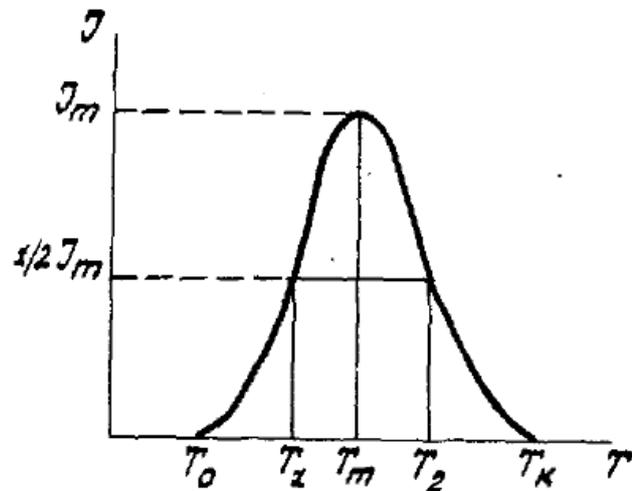


Рис. 5.4. Кривая термовысвечивания в случае одного сорта ловушек.

# Константа Урбаха

Пропорциональность глубины ловушки (в эВ) и температуры максимума связанного с ней пика термолюминесценции было подмечено еще Урбахом [Urbach 1930] в виде

$$E(\text{eV}) = T_m/K,$$

где величина  $K \sim 500 \text{ grad.K/eV}$ . Позднее после нахождения уравнений термолюминесценции (randall 1945) определено, что точке максимума пика термолюминесценции выполняется условие [Curie 1961]

$$\frac{\beta E}{kT_m^2} = s \exp\left(-\frac{E}{kT_m}\right)$$

где  $\beta$  — скорость нагрева,  $s$  — частотный фактор,  $T^*$  - температура максимума.

Численными расчетами этого трансцендентного уравнения, имеющего три независимых переменных  $E$ ,  $T_m$  и  $s/b$ , установлена зависимость постоянной Урбаха от отношения частотного фактора к скорости нагрева  $s/b$  [Curie 1963].

Достаточно точная связь глубины ловушки и температуры максимума пика термолюминесценции записывается в виде  $E=(T^*-T_0)/K$

здесь температура  $T_0$ , имеющая величину 5-15 K, и постоянная Урбаха  $K$  зависят от соотношения  $s/b$ . И табулированы в широком интервале отношений  $s/b$  от  $10^4$  до  $10^{15}$  [Curie 1963].

В настоящее время уравнение (1) легко решается численно с помощью функции Ламберта, введенной компьютерные расчеты в 1980 годах. В самом деле, если трансцендентное уравнение можно привести к виду  $y = x * e^x$ , то решение будет  $x = W(y)$ .

Преобразуя уравнение (1), получим

$$E/kT_m * \exp(E/kT_m) = s/b * T_m$$

отсюда

$$E/kT_m = W(s/b * T_m) \text{ и } E = W(s/b * T_m) * kT_m$$

Вычисление функции Ламберта доступно в ряде математических программ и реализовано также на языке Питон.

В работах Боса [Bos 2011, 2017] предложена другая запись наблюдаемой экспериментально связи  $E$  и  $T_m$  в форме

$$E = C_u * kT_m$$

где  $k$  — постоянная Больцмана, а  $C_u$  — константа Урбаха. Очевидно, что  $C_u = 1/(kK)$ . Константа Урбаха в такой форме является безразмерной. По нашим расчетам  $C_u$  пропорциональна  $\lg(s/b)$ .