

МОДЕЛИ ОСОБЕННОСТЕЙ ТЕПЛООВОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ И ДЕФЕКТАМИ

© 2007 В.И. Алтухов, Б.А. Казаров, Н.В. Баландина, О.В. Тимченко

Георгиевский технологический институт (филиал)
Северо-Кавказского государственного технического университета

В работе представлены результаты разработки методов описания механизмов рассеяния фононов и математического моделирования особенностей тепловых (транспортных) свойств кристаллов с дефектами, примесями и структурными фазовыми переходами (сегнетоэластики Hg_2Cl_2 и полупроводники $\text{A}_2\text{B}_6 - \text{ZnSe:Ni}$). Проведена оценка динамического критического показателя для сегнетоэлектриков-полупроводников SnTe и GeTe ; предложена модель эффекта биений для интерпретации особенностей теплового сопротивления Hg_2Cl_2 около температуры сегнетоэластического фазового перехода T_c ; дано объяснение эффекту гигантского теплосоппротивления в легированных кристаллах ZnSe:Ni .

Введение

Тепловые и электрические свойства сегнетоэлектрических, сегнетоэластических кристаллов и полупроводников типа A_2B_6 при низких температурах отличаются крайне высокой чувствительностью к наличию в их кристаллической решетке (матрице) структурных фазовых переходов (СФП), дефектам, примесям или их комплексам (кластерам, доменам и наноструктурам). Вместе с тем, реальный кристалл с дефектами и фазовым переходом (особенно вблизи температуры СФП $T = T_c$) представляет собой весьма сложную физическую систему, не допускающую пока еще строгого теоретического описания [1-5, 17]. К тому же в последнее время появились новые весьма интересные данные по аномальному поведению теплопроводности $K(T)$ для ряда сегнетоэлектрических (KDP) и сегнетоэластических (Hg_2Cl_2) кристаллов [6-9]. На кристаллах селенида цинка легированных никелем (ZnSe:Ni), кристаллах ZnSe:Fe (а также $\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$) обнаружено гигантское возрастание (на два порядка и даже более чем в 200 раз) теплосоппротивления (W) с максимумами при $T=15$ К и $T=20$ К соответственно [10-13]. Несмотря на значительные успехи в области технологий выращивания отмеченных выше кристаллов и материалов микроэлектроники, разработка приборов и структур на их основе зачастую сдерживается из-за отсутствия надежного описания, численных расчетов, математического моделирования и должной интерпрета-

ции физических свойств этих материалов.

В настоящей работе представлены результаты математического моделирования механизмов рассеяния фононов и тепловых свойств материалов твердотельной микроэлектроники: сегнетоэлектрических (эластических) кристаллов KH_2PO_4 , Hg_2Cl_2 ; SnTe , GeTe (A_4B_6) и полупроводников типа A_2B_6 . Рассмотрены: модели температурной зависимости теплопроводности кристаллов с фазовым переходом, флуктуационный эффект биений различных каналов рассеяния фононов, модель гигантского теплосоппротивления ($W = K^{-1}$) в легированных кристаллах типа A_2B_6 .

Моделирование поведения теплового сопротивления реальных кристаллов около T_c Теплопроводность систем с фазовыми переходами и дефектами.

Критические показатели

Для коэффициента теплопроводности (K) гармонического кубического кристалла с примесями или дефектами (кластерами, коллоидами, доменами) ранее была получена формула типа Кубо-Гринвуда [4,5]:

$$K(T) = \frac{1}{6\pi k_B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 \omega^2}{T^2 V} n(\omega) [n(\omega) + 1] |Sp| \Pi(\omega)|^2 d\omega; (1)$$

$$\Pi^p(l'_i \omega) = \sum_{l''} Q^p(l'') \text{Im} D(l'' l'_i \omega), (1a)$$

где V – объем кристалла; Q – величина, связанная с массами и силовыми постоянными

атомов в узле l кристаллической решетки; $D(w)$ – функция Грина реального кристалла с гамильтонианом H .

При наличии в системе фазового перехода, используя уравнение Бете-Солпитера для корреляционной функции ток-ток [1,14] можно получить рекуррентные формулы (соотношения) для траекторий гамильтониана $U(l), r(l)$, определить при малых $\varepsilon = 4 - d$ (d – размерность пространства) положение неподвижной точки (U_*, r_*) и критические индексы поведения системы при $T \rightarrow T_c$. Такой подход позволяет найти численные значения критических показателей параметра порядка (поляризации) (β), восприимчивости (γ), корреляционной длины системы (ν), внешнего поля (δ), корреляционной функции (η) и теплоемкости (α) [15, 16]:

$$\beta = 0,334, \quad \gamma = 1,166, \quad \nu = 0,583, \\ \delta = 4,50, \quad \eta = 0 \quad \text{и} \quad \alpha = 0,166.$$

В результате анализа экспериментальных данных по теплопроводности $K(T)$ и сравнения этих данных с результатами расчетов [1] авторам удалось найти критический индекс $\gamma = \alpha + z\nu$ (z – динамический показатель корреляционной функции ток-ток), определяющий поведение сечения поглощения звука около T_0 . Найденное значение $\gamma = 1$ совпадает с результатом для свободного (среднего) поля, где в соответствии с гипотезой подобия $\alpha = 0$, $\nu = 1/2$ и тогда $z = 2$. Однако, в точке $T = T_c > T_0$ значение ω_0 часто не обращается в ноль и особенность $K(T)$ может оказаться “затушеванной”. Кроме того, критический индекс z в случае релаксационной динамики

можно определить [14] в виде $z = 2 + \frac{1}{2}\eta$ (та-

кое же выражение, но другим способом было получено в [17]), что по своему значению близко к результату ε -разложения $z = 2 + c\eta$

$$(c = 6 \ln \frac{4}{3} - 1 \approx 0,73) \quad \text{и к значению}$$

$z = 2,095 \pm 0,008$, полученному методом Монте-Карло [18] для однородной системы. В то же время согласно теории подобия [14,19]

$$z = 2 + \frac{\gamma - \rho}{\nu} \quad \text{и по данным опытов и расчетов}$$

температурного поведения проводимости сег-

нетоэлектриков-полупроводников (SnTe, GeTe [4, 5]) около T_c с учетом значений показателей (по теории свободного поля Ландау) $\gamma = 1$ и $\nu = 1/2$, получаем $\rho = 1 \div 1,25$ и $z \cong 2$, близкое к полученному выше результату $z = 2,096$.

Расчет теплопроводности $K(T)$ в модели Дебая

Для расчета температурной зависимости $K(T)$ в простой дебаевской модели кристалла с фазовым переходом с учетом (1) получаем [4, 20]:

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

где α – коэффициент при интеграле теплопроводности, связанный с квадратом скорости фононов; θ – характеристическая температура кристалла (температура Дебая); $\gamma(x)$ – сумма обратных времен релаксации, обусловленных рассеянием фононов в исходном (“идеальном”) кристалле (γ_0), за счет механизмов структурного фазового перехода (γ_c), дефектов и их комплексов (γ_k) и за счет резонансного рассеяния на примесях (γ_r).

Для описания обратного времени релаксации, обусловленного рассеянием фононов на коллоидах (наночастицах) с радиусом r и концентрацией N можно воспользоваться следующим выражением [5, 13, 21]:

$$\gamma_k(x, r, N) = N \cdot M \cdot r^2 \cdot \begin{cases} 1 + R \cdot \exp\left(\frac{-r \cdot x \cdot y}{3\nu_0}\right), & b < \frac{r \cdot x \cdot y}{\nu_0}; \\ \left(1 + R \cdot \exp\left(\frac{-b}{3}\right)\right) \cdot \left(\frac{r \cdot x \cdot y}{\nu_0}\right)^4, & b \geq \frac{r \cdot x \cdot y}{\nu_0}. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь R – параметр, зависящий от упругих свойств коллоида и матрицы; b – постоянная, связанная с R ; $M = \pi \cdot \nu_0 \cdot 10^3$; ν_0, y, x – приведенные скорость, температура Дебая и частота фонона соответственно; $x = \omega/\omega_D$, $\omega_D = k_B \theta / \hbar$ – дебаевская частота кристалла; k_B – постоянная Больцмана.

Флуктуационный эффект биений в сегнетоэлектриках (эластиках)

В результате оптимального подбора параметров теории и модельных расчетов по

формулам (2) и (3) нами были сопоставлены данные теории и опытов для систем Hg_2Cl_2 и типа KDP (KH_2PO_4) и показано, что вблизи T_c в кристаллах типа KDP в целом ведущую роль играет квазиупругое рассеяние фононов $\gamma_c(x)$. Однако рассеяние на комплексах (коллоидах, доменах) – наноструктурах $\gamma_k(x)$, наиболее интенсивно образующихся около температуры T_c , определяет условия появления и характер флуктуационного эффекта биений различных каналов рассеяния фононов. Для кристаллов типа KDP ($T_c = 122 K \cong T_3 = 121,99 K$) удалось подтвердить предположение о том, что “флуктуационный эффект биений” различных каналов рассеяния фононов приводит к особому поведению теплового сопротивления $K(T)$ вблизи T_c в виде излома, полочки или весьма узкого пика ($\gamma_T = T_3 - T_2 \approx 0,2 \div 0,3 K$ - максимум) на фоне широкого спада, прогиба или провала около T_c . В случае Hg_2Cl_2 наблюдается довольно широкий $\gamma_T \approx 6 - 10 K$

несимметричный максимум, расположенный в области широкого $\Delta T \approx 80 - 100 K$ провала (критической аномалии) с температурой фазового перехода $T_c = 186 K$ (рис. 1). Отметим, что на кристаллах триглицинсульфата (ТГС) в области температур $\Delta T \approx 3 K$ около T_c при $T > \theta$ [6,7] наблюдается яркая узкая особенность (типа “провал”), видимо обусловленная эффектом “флуктуационных состояний” (или биений), требующая однако отдельного рассмотрения.

Таким образом, формулы (2) и (3) моделируют характер флуктуационного эффекта биений в кристаллах типа KDP , Hg_2Cl_2 (ТГС) и подтверждают его флуктуационное происхождение, определяя условия и область ДТ его проявления. В кристаллах Hg_2Cl_2 в частности в интервале $\Delta T \cong 0,5^0 K$ около T_c возможны неустойчивые (метастабильные) состояния [22, 23]. Здесь важную роль играет соотношение времен релаксации фононов, связанных с кластерами γ_k (доменами) и цен-

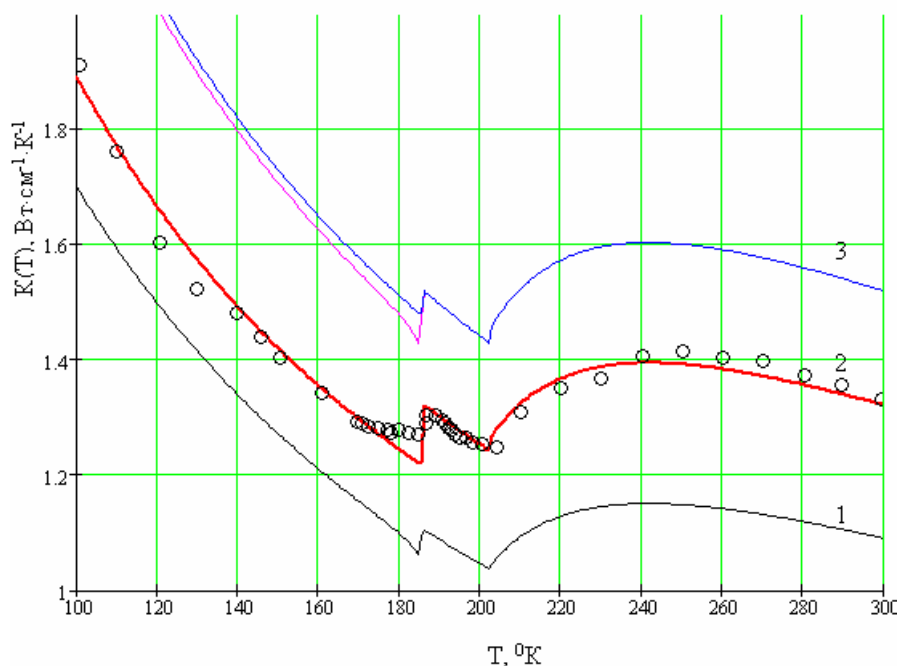


Рис. 1. Температурная зависимость теплопроводности кристаллов Hg_2Cl_2 [6-8]
Сплошные линии – результаты расчетов:

кривая 1 смещена вниз для наглядности – число коллоидов $N_1 = 0,95(\cdot 10^{14} \text{ см}^{-3})$ и $N_2 = 0,98$

при $T > T_c = 186^0 K$ и $T < T_c$ соответственно (при $T \geq 205^0 K$, $\gamma_c \geq \gamma_k$); 2 - $N_1 = 0,98$ и $N_2 = 1,2$;

кривая 3 смещена вверх – $N_1 = 0,98$ ($T > T_c$) и $N_2 = 1,05$ (или $N_2 = 1,07$, $\gamma_c \geq \gamma_k$

для $180^0 K < T < T_c$) при $T < T_c$

тральным пиком γ_c . При этом сравнение результатов расчетов с данными опытов показывает, что кластеры (коллоиды) наиболее интенсивно образуются в достаточно широкой области температур (20 – 30 °K) около T_c . При переходе в низкосимметричную фазу происходит резкое незначительное увеличение их числа и затем концентрация кластеров уменьшается при $T \rightarrow 0$.

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.

Гигантское теплосоппротивление в легированных кристаллах типа A_2B_6
В последнее время появились новые ин-

тересные данные по аномальному поведению кривой теплопроводности $K(T)$ для ряда кристаллов с нанокластерами, с комплексами дефектов, с коллоидами, другими возможными пространственно-коррелированными образованиями (системами), или со структурными фазовыми переходами. В частности, как было сказано во введении, на кристаллах селенида цинка (ZnSe: Ni) легированных никелем и кристаллах ZnSe: Fe недавно обнаружено гигантское теплосоппротивление с максимумами при $T=15$ K и $T=20$ K соответственно [10-12]. Подобные явления наблюдаются на кристаллах HgSe: Fe с пространственно-коррелированной системой ионов железа [13].

Для описания обратного времени релаксации ($\tau_r^{-1} = \gamma_r$), определяющего резонансное рассеяние фононов на примесях можно использовать следующее выражение [5]:

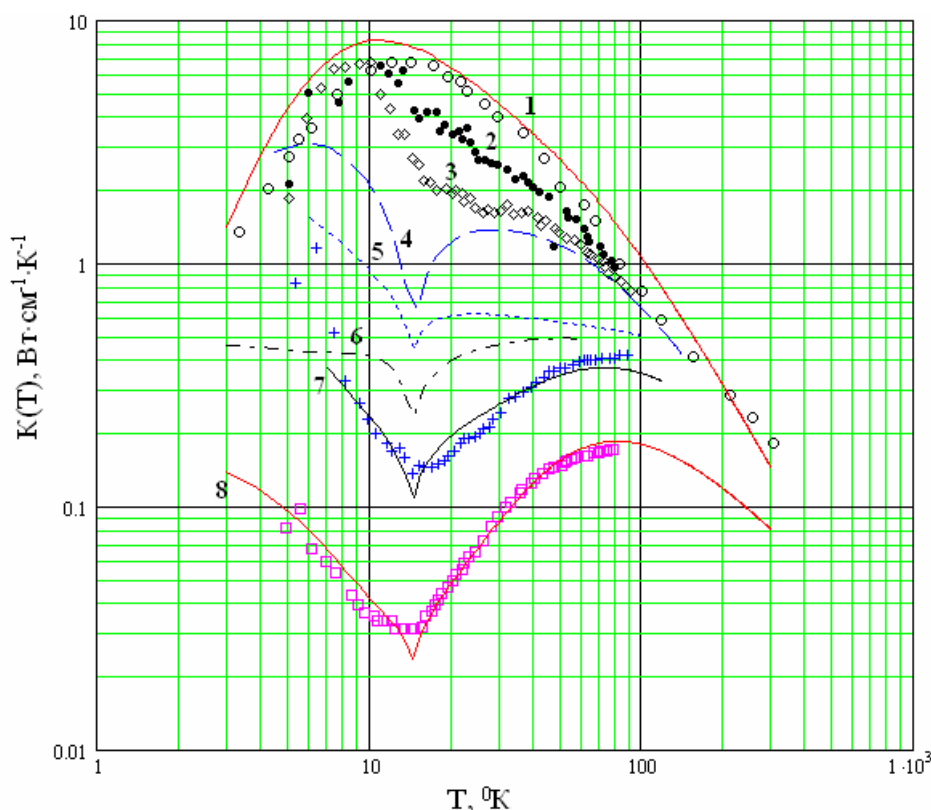


Рис. 2. Температурная зависимость теплопроводности кристаллов ZnSe: эксперимент [10,11]. Обозначения (сверху вниз) 1,2 – чистый ZnSe; 3,7,8 – образцы ZnSe:Ni с различной концентрацией никеля: 3 – $c_0 = 0.00043$ (10^{21} cm^{-3}), 7 – 0.036, 8 – 0,10. Результаты расчетов: для чистого кристалла (кривая 1); 4 – с фазовым переходом $\gamma_c \neq 0$, $T_c = 14.5 \text{ } ^\circ\text{K}$; 5 – $\gamma_c \neq 0$, $\gamma_r \neq 0$ ($c_0 = 0.005$); 6 – $\gamma_k \neq 0$, число коллоидов $N = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$; 7 и 8 – величины γ_c и γ_r подобраны в соответствии с данными опытов.

$$\tau_r^{-1} = p \frac{c_0 \cdot D_0 \cdot \Gamma_0 \cdot (xy)^{2n}}{y^4(x^2 - x_0^2)^2 + \Gamma_0^2(xy)^{2n+2}} \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}. \quad (4)$$

Здесь c_0 – концентрация примесей или дефектов (систем), $\omega_D \equiv \nu p$ ($p = 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\Gamma_0 = 6$, $D_0 = 1,21 \cdot 10^6$), $n = 4$ или 1,2,3 и зависит от характера рассеяния фононов на резонансной частоте $x_0 = \omega_0/\omega_D$, связанной с примесью, дефектом, с туннельными (спиновыми) уровнями или другими фоннными резонансами (например, двухуровневые системы в спиновых стеклах).

Формулы (2) – (4) со скоростью релаксации $\gamma = \gamma_0 + \gamma_c + \gamma_k + \gamma_r$ (выражения для γ_0 и γ_c были взяты согласно [1, 4]) использовались для расчетов кривой $K(T)$ кристаллов ZnSe ($\theta = 280^\circ \text{ K}$) сильно легированных никелем. Результаты расчетов сопоставляются с данными соответствующих экспериментов (рис. 2).

Расчитанные кривые $K(T)$ в целом качественно согласуются с поведением кривых теплопроводности исследуемых кристаллов. Однако, в теории слабо обозначены заметные на опыте перегибы на кривых 3 и 7 в области $17 - 30^\circ \text{ K}$, связанные с γ_r . Еще менее заметны резонансы при $T = 9 - 11^\circ \text{ K}$ на кривых 7 и 8. Эти резонансы (справа и слева) слабо выражены, поскольку расположены непосредственно около минимумов теплопроводности (кривые 7 и 8), связанных с фазовым переходом при $T_c = 14,5^\circ \text{ K}$, наблюдающимся также на кривых 2 и 3. В теории влияние γ_c вблизи T_c несколько заметнее, чем на опыте, а положение минимума на кривой $K(T)$ смещено на $0,5 - 1^\circ \text{ K}$ вправо относительно T_c . Значительное расхождение теории с экспериментом имеет место на кривых 7 и 8 при $T \leq 6^\circ \text{ K}$. Возможно это связано с неоптимальным выбором параметров скоростей релаксации фононов на комплексах дефектов (коллоидах) γ_k и на границах образцов кристаллов. Однако, поведение кривых $K(T)$ в области низких температур ($T < 6^\circ \text{ K}$) требует отдельного рассмотрения, тем более что при $T < 6^\circ \text{ K}$ на опыте на всех кривых имеется всего одна-две точки. Отметим, что развитая в работе теория удовлетворительно описывает поведение теплопроводности ZnSe:Ni, а подобранные в ходе вычислений параметры времен релаксации фононов от-

вечают физически обоснованным представлениям о характере рассеяния тепловых фононов и стадиях дефектообразования, реализующихся в кристаллах типа A_2B_6 по мере их легирования [21].

Обсуждение и выводы

На основе формул типа Кубо-Гринвуда получено выражение, позволяющее рассчитывать теплопроводность сегнетоэлектрических (эластических) кристаллов и полупроводников типа A_2B_6 на микроскопическом уровне. Предложены новые методы и модели для расчета тепловых свойств сегнетоэлектриков (эластиков) и кристаллов A_2B_6 ; проведен численный анализ влияния различных механизмов рассеяния фононов на температурную зависимость теплопроводности этих материалов. Таким образом, в работе:

- разработана теория и построена модель флуктуационного эффекта биений и температурного поведения теплопроводности сегнетоэлектриков типа KDP (KH_2PO_4), ТГС (флуктуационные состояния) и сегнетоэластиков Hg_2Cl_2 вблизи структурного фазового перехода. Для кристаллов типа KDP удалось подтвердить предположение о том, что “флуктуационный эффект биений” различных каналов рассеяния фононов приводит к особому поведению теплового сопротивления $K(T)$ вблизи T_c в виде излома, полочки или весьма узкого пика ($\gamma_T \approx 0,2 \div 0,3 \text{ K}$ – максимум) на фоне широкого спада, прогиба или провала около T_c . Путем изменения величин управляющих параметров системы появляется возможность реализации различного температурного поведения теплового сопротивления и условий проявления эффекта биения;

- дано объяснение эффекту гигантского теплосоппротивления, обнаруженному в широкой области температур $T = 10 \div 30^\circ \text{ K}$ в легированных кристаллах ZnSe. Используемые при вычислении кривых $K(T)$ и $s(T)$ параметры времен релаксации носителей отвечают физически обоснованным представлениям о характере рассеяния тепловых фононов в легированных кристаллах ZnS и ZnSe.

Вместе с тем, в работе достигнуто качественное вполне приемлемое соответствие теории и эксперимента, которое имеет место для всех проведенных расчетов.

В заключение авторы выражают признательность коллегам В.П. Сахненко, А.С. Сигову, Б.А. Струкову и С.А. Садыкову, обсуждавшим результаты настоящей работы и сделавшим ряд полезных замечаний по ходу ее оформления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алтухов В.И., Ростова А.Т., Казаров Б.А. Рассеяние фононов на точечных дефектах структуры, комплексах-наночастицах и типичные особенности теплового сопротивления реальных кристаллов и сегнетоэлектриков // Нано- и микросистемная техника. 2006. №3. 2006. №4.
2. Струков Б.А. Фазовые переходы в сегнетоэлектрических кристаллах с дефектами. Соросовский Образовательный Журнал// 1996. №12.
3. Сигов А.С. Сегнетоэлектрические тонкие плёнки в микроэлектронике // Соросовский образовательный журнал. 1996. №10
4. Алтухов В.И. Симметрия и структурные фазовые переходы в кристаллах. СевКавГТУ: Ставрополь, 2003.
5. Алтухов В.И. Основы теории кинетических свойств кристаллов с дефектами и фазовыми переходами: диэлектрики и сегнетоэлектрики. Ставрополь: СевКавГТУ, 2003.
6. Strukov B.A. and Belov A.A. Heat transport properties of order-disorder type ferroelectrics. *Ferroelectrics*, 126, P. 299 (1992).
7. Strukov B.A. and Belov A.A. Heat transport properties of ferroelectrics and related materials. *Phase transition*. v. 51, p. 175 (1994).
8. Strukov B.A., Belov A.A. and Altukhov V.I. Study of phonon scattering processes in displacive ferroelectrics by means of heat conductivity measurement // *Ferroelectrics*. 159. P. 25-30. (1994).
9. Altukhov V.I., Strukov B.A. The critical phonon scattering and peculiarities of the thermal conductivity in ferroelectrics // *Cond. Matt. Phys.* v. 5, № 4, pp. 769 – 776. (2002).
10. Соколов В.И., Лончаков А.Т. Необычно сильное резонансное изменение низкотемпературной теплопроводности кристаллов ZnSe: Ni, обусловленное рассеянием фононов на индуцированных заряженными примесями ангармонических модах // *ЖЭТФ, Письма*. 2001. Т.73, вып.11-12.
11. Михеев В.М. Гигантское теплосоппротивление ZnSe: Ni при низких температурах // *Физика твердого тела*. 2003. Т.45, вып. 2.
12. Лугуева Н.В., Лугуев С.М. Исследование влияния дефектов структуры на теплопроводность поликристаллических образцов ZnS, ZnSe, CdTe. Химия и компьютерное моделирование // *Бутлеровские сообщения. Приложение к спецвыпуску*. 2002. № 10.
13. Кулеев И.Г., Лончаков А.Т., Арапова И.Ю. Рассеяние фононов пространственно-коррелированной системой ионов железа и низкотемпературная аномалия теплопроводности кристаллов HgSe : Fe // *Физика и техника полупроводников*. 2000. Т. 34, вып. 4.
14. Алтухов В.И., Казаров Б.А., Тимченко О.В. Транспортное уравнение Бете-Солпитера и уравнения ренормгруппы для систем с когерентными состояниями и фазовым переходом // *Сборник докладов междунауч. конф. “Системный синтез и прикладная синергетика”*. Пятигорск, 2006.
15. Алтухов В.И., Казаров Б.А., Тимченко О.В. Оценка критического показателя теплопроводности в фоннонной модели структурного фазового перехода // *Межвузовский научный сборник “Управление и информационные технологии”*. Пятигорск, 2006.
16. Алтухов В.И., Тимченко О.В. Критическая динамика и прямая оценка критических показателей в самосогласованной фоннонной модели сегнетоэлектрика. *Межвузовский научный сборник “Управление и информационные технологии”*. Пятигорск. 2006.
17. Сахненко В.П., Тимонин П.Н. Критическая динамика изотропной фоннонной модели // *ЖЭТФ*. 1983. Т. 85. №4 (10). 1983. Т. 76. 1979. №1
18. Прудников В.В., Белим С.В., Осинцев Е.В., Федоренко А.А. // *ФТТ*. 1998. Т. 40. №8.
19. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир. 1973.
20. Ростова А.Т., Казаров Б.А., Алтухов В.И. Математические модели и типичные особенности теплового сопротивления сегне-

- тоэлектриков // Известия вузов Северо-Кавказский регион. Технические науки. 2005. Приложение №2. г. Ростов-на-Дону.
21. Алтухов В.И., Казаров Б.А., Баландина Н.В. Модель флуктуационного эффекта и особенности теплового сопротивления кристаллов с дефектами и их комплексами-наноструктурами. Материалы IX Междисциплинарного, международного симпозиума “Фазовые превращения в твердых растворах и сплавах”. Ростов-на-Дону: п. Лоо, 2006.
22. Вихнин В.С., Зайцев О.А. Фазовые переходы и динамические эффекты в кристаллах, обладающих одноячеечными потенциалами с многоямным возбужденным состоянием // ФТТ. 1997. Т.39. №3.
23. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1973.

MODELS OF PARTICULARITY OF HEAT RESISTANCE OF CRYSTALS WITH PHASE TRANSITION AND DEFECTS

© 2007 V.I. Altukhov, B.A. Kazarov, N.V. Balandina, O.V. Timchenko

Georgievsk Technology Institute - Branch of North-Caucasian State Technical University

In work presented results of development of methods of description of mechanisms of diffusing an phonons and mathematical modeling of particularities heat (transport) characteristics of crystals with defects, admixtures and structured phase transition (Hg_2Cl_2 and semiconductors $\text{A}_2\text{B}_6 - \text{ZnSe:Ni}$). Conducted evaluation of dynamic critical factor for ferroelectrics-semiconductors SnTe and GeTe; offered model of effect of beating for interpreting the particularities of heat resistance Hg_2Cl_2 near the temperature of phase transition T_c ; given explanation to the effect gigantic resistance in doping crystals ZnSe:Ni.