

UOT: 536.21; 537.222.22; 621.315.592

GaSb-GaTe BÖRK MƏHLULLARDA TERMOELEKTRİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİ

R.N.RƏHİMOV, E.R.MƏMMƏDOVA, D.H.ARASLI, A.Ə.XƏLİLOVA, A.S.QƏHRƏMANOVA

Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu
AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid pr., 131
rashadrahim48@gmail.com

Daxil olub: 14.01.2021
Çapa verilib: 25.02.2022

REFERAT

GaSb-GaTe bərk məhlulların preslənmiş nümunələrində Hall əmsalı, elektrik keçiriciliyi, istilik keçiriciliyi və termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığı tədqiq olunub. İstilik keçiriciliyin temperaturdan asılı olaraq kəskin azaldığı və yuxarı temperaturalarda fonon sistemin amorflaşması müşahidə olunub, həmçinin termoelektrik faydalılıq əmsalını yuxarı temperaturalarda yüksək olduğu göstərilib.

Açar sözlər: bərk məhlul, elektrik keçiriciliyi, istilik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.

GİRİŞ

Dünyada sərf olunan enerjinin üçdə ikisi istilik şəklində ətrafa yayılaraq ekoloji problemlər yaratdığına görə alternativ enerji mənbələrindən istifadə daha çox gündəmə gəlib. Termoelektrik çeviricilər istilik enerjisini birbaşa elektrik enerjisinə çevirdiyi üçün daha səmərəli yarımqeçirici termoelektrik maddələrin yaradılması aktuallığını itirməyib.

Məlumdur ki, termoelektrik çeviricinin səmərəliliyi faydalılıq əmsalı ilə qiymətlənir [1]

$$ZT = \sigma S^2 T / k, \quad (1)$$

burada S - Zeebeck əmsalı, T - termoelektrik çeviricinin yerləşdiyi mühitin orta temperaturu, k - istilik keçiriciliyi, σ - elektrik keçiriciliyidir. Elektrik keçiriciliyi $\sigma = ne\mu$ yük daşıyıcıların μ yürtlüklüyündən və n konsentrasiyasından asılıdır.

(1) ifadəsindən görüldüyü kimi faydalılıq əmsalını yüksəltmək üçün Zeebeck əmsalı (S) və elektrik keçiriciliyi (σ) yüksək olmalı, istilik keçiriciliyi (k) isə aşağı olmalıdır. Tədqiqatlar göstərir ki, yük daşıyıcıların konsentrasiyası 10^{19} - 10^{20} sm⁻³ arasında olan maddələrdə faydalılıq əmsalı maksimum olur [2]. Seebeck əmsalının böyük olmasını təmin etmək üçün yalnız bir növ daşıyıcı olmalıdır. Qarşıq n və p tipli keçiricilik olduqda zaman hər iki

yük daşıyıcı istə təradən soyuq tərəfə axın edəcək və sonda aralarında neytrallaşma gedərək Seebeck gərginliyini azaldacaq. Aşağı konsentrasiyalı daşıyıcı olan izolyatorlar və yarımqeçiricilər böyük Seebeck əmsallarına malik ola bilər, lakin elektrik keçiricilik az olduğundan faydalılıq əmsalı aşağı olacaq. Metallar və ya cırlaşmış yarımqeçiricilər üçün (parabolik zolaq və səpələnmiş enerji) asılı olmadığı yaxınlaşmada) Seebeck əmsalı [2]

$$S = \frac{8\pi^2 k_B^2}{3e\hbar^2} m^* T \left(\frac{\pi}{3n}\right)^{2/3} \quad (2)$$

burada n - yük daşıyıcıların konsentrasiyası, m^* - onların effektiv kütləsidir.

Məxsusi yarımqeçiricilərdə ümumi Zeebeck əmsalı belə ifadə olunur

$$S = \frac{S_e \sigma_e + S_h \sigma_h}{\sigma_e + \sigma_h}, \quad (3)$$

burada S_e/S_h - elektron/deşiklərə uyğun Zeebeck əmsalı, σ_e/σ_h - elektron/deşik keçiriciliyidir, S_e mənfi, S_h müsbət olduğu üçün elektron və deşiklərin birgə mövcudluğu S -in qiymətini azaldacaq.

Yarımqeçiricilərin olava legirlənməsi yük daşıyıcının bir növünün konsentrasiyasını artırır, digərini isə demək olar ki, aradan qaldırır və bu Seebeck əmsalında azalmanın qarşısını alır. Aşqarlanmış

yaxın olur, ya da onun içərisinə girir və bu yarımkəçiricinin qismən çirkləşməsinə gətirir. Bu halda yükdaşıyıcıların konsentrasiyası Fermi-Dirak paylanması ilə ifadə olunur [3]

$$n = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} F_{1/2}, \quad (4)$$

burada $F_{1/2}$ -Fermi integralı aşağıdakı kimi ifadə olunur

$$F_{\nu} = \int_0^{\infty} \frac{z^{\nu}}{1 + \exp(z - \eta)} dz, \quad (5)$$

burada $\eta = E/k_B T$ yük daşıyıcıların gətirilmiş enerjisi, $\eta_F = \mu/k_B T$ gətirilmiş Fermi enerjisidir.

$$S = \pm \frac{k_B}{e} \left[\frac{\left(\frac{z^*}{z^* + 1} \right) F_{3/2}}{\left(\frac{z^*}{z^* + 1} \right) F_{1/2}} - \eta \right], \quad (6)$$

burada λ - yük daşıyıcıların səpilmə parametri və qəfəs rəqsələrdən səpilmə halında $-1/2$, ionlaşmış defektlərdən səpilmə halında isə $+3/2$ olur.

(2) - (6) tənliklərdən götürür ki, (S^2/σ) və ya $(S^2/n\mu)$ - güc faktorun qiyməti Fermi səviyyəsi (η), səpilmə parametri (λ) və yük daşıyıcıların effektiv kütləsindən (m^*) asılıdır. Yükdaşıyıcıların effektiv kütləsinin böyük olması konsentrasiyanın yüksək, yüüklüklüyün isə aşağı olması ilə nəticələnir. Effektiv yüüklüklüyü ($\mu^* = \mu(m^*)^{2/3}$) yüksək olan yarımkəçirici böyük elektrik keçiriciliyinə malik olur. Fermi səviyyəsi bir az keçirici zolağa doğru sürüşdükdə, başqa sözlə yarımkəçirici qismən çirkləşirdə S^2/n üçün maksimum qiymət əldə edilir [2].

Bərk məhlullarda istilik enerjisi daha çox elektronlar və fononlarla daşınır. Ümumi istilik keçiriciliyi əsasən elektron və qəfəs istilik keçiriciliklərin cəmindən ibarətdir. Videman-Franz qanununa görə elektronların payına düşən istilik keçiriciliyi maddənin elektrik keçiriciliyi ilə bağlıdır

$$k_e = \sigma L T, \quad (7)$$

burada L - Lorents sabitidir ($L = 2.4 \cdot 10^{-8}$) və elektronun çirkləşmə dərəcəsinə asılıdır.

Qəfəs rəqsələri ilə (fononlarla) daşınan istilik keçiriciliyi aşağıdakı kimi təyin olunur

$$k_q = \frac{1}{3} C v l, \quad (8)$$

C - istilik tutumu, v - kristal daxilində səs sürəti, l - fononların sərbəst qaçış yoludur.

Göründüyü kimi fononların sərbəst qaçış yoluunu azaldaraq qəfəs istilik keçiriciliyini azaltmaq ən təsirli bir metoddur. Bərk məhlul alarkən kütlənin və deformasiya sahəsinin flüktuasiyası ilə yaranan nöqtəvi defektlərdən səpilmə güclənəcək və fononların sərbəst qaçış yolu qısalacaq [4,5].

Bərk maddələrdə fonon-fonon səpilmə, sərhəddən, və nöqtəvi defektlərdən səpilmə daxil olmaqla bir neçə fərqli fonon səpilmə mexanizmi yaranır və ümumi səpilmə müxtəlif proseslərin cəminə bərabər olur.

Yuxarı temperaturlarda ($T > 0$ - Debay temperaturu) fonon-fonon və fononların nöqtəvi defektlərdən səpilmənin relaksasiya müddəti nəzərə alınan Klemens formulü belədir [6-8]

$$K_q = K_0 \left(\frac{\omega_0}{\omega_D} \right) \arctg \left(\frac{\omega_D}{\omega_0} \right), \quad (9)$$

$$\left(\frac{\omega_0}{\omega_D} \right)^2 = \frac{h}{2\pi^2 v_k \theta_A}, \quad (10)$$

A - səpilmə parametri və aşağıdakı kimi ifadə olunur

$$A = \frac{\Omega_0}{4\pi^2} x(1-x) \left(\frac{\pi M}{M} \right)^2, \quad (11)$$

burada k_0 - əsas qəfəs istilik keçiriciliyi, ω_D - Debay tezliyi, ω_0 - fononların nöqtəvi defektlərdən səpilmədə relaksasiya müddətinin ($\tau_D^{-1} = A\omega^4$) üç fononlu U - proseslərin relaksasiya müddətinə ($\tau_U^{-1} = B\omega^2 T$) bərabərliyi tezlikdir; Ω_0 elementar özəyin həcmi, x - aşqar atomunun payını, M - aşqar və əsas atom arasındakı kütlə fərqi və M - elementar özəyin orta kütləsini göstərir.

(9), (10) ifadələrdən götürür ki, qəfəsin istilik keçiriciliyi $A^{1/2}$ ilə tərs mütənəsbdir. Bu parametrlər eyni kristal quruluşlu birləşmələr arasında alınan bərk məhlulun qəfəs istilik keçiriciliyini azaltmasına kömək edə bilər.

Aşqar və əsas atomun eyni valentliyə sahib olan izoelektron atomla əvəz olunması yüüklüklüyü

azaltmadan faydalılıq göstəricisini daha da artırmaqla. Əvəzədi izoelektron atom qəfəsə neytral qaldıqda elektronları səpəcək bir Kulon qüvvəsi yaradır və elektrik keçiriciliyi azalır.

Göründüyü kimi bərk məhlullarda əsas və aşqar atomlar arasındakı kütlə fərqi və aşqarların konsentrasiyası qəfəs istilik keçiriciliyini azaltmada mühüm rol oynayır. Ona görə də müxtəlif ikiqat birləşmələr arasında alınan yarımkəçirici bərk məhlullarda ilkin maddələrin miqdarını dəyişməklə öncədən məlum xassəli material almaq mümkündür. Bərk məhlulların yaranacağı ikiqat birləşmələrin birinin kristallik quruluşunda, ya da tam fərqli bir quruluşda kristallaşma bilər. Belə məhlulların xassələri atomlar arası qarşılıqlı təsirin nəvündən, onların energetik xassəsindən güclü asılı olur.

Daha çox maraq kəşb edən maddələr almazabənzər struktura malik olan və bütün atomları heterovalent olan üçqat, dördqat mürəkkəb yarımkəçiricilərdir. Fiziki xüsusiyyətlərinə görə mikroelektronikada geniş tətbiq imkanlarına malik olan GaSb birləşməsi sintez olunmuşda, adətən onun keçiriciliyi p-tip olur və yük daşıyıcıların konsentrasiyası 10^{17}cm^{-3} qiymətindəndə al olan kristal almaq mümkün olur. Ona görə də onun zona quruluşu ilə bağlı xassələri öyrənmək çətin olur. GaSb birləşməsinin keçirici zonasının ən aşağı minimumu Brüllənin zonasının mərkəzində yerləşir. Onun qadağan zonasının eni mütləq sıfır temperaturunda 0.8eV, 300K-də 0.7eV, ərimə temperaturu 985K, qəfəs sabiti 6.09593Å [9] müəyyən olunub.

III-VI qrup birləşmələri kimi GaTe birləşməsində hor aniona doqquz valent elektronu düşür - yəni adi yarımkəçiricilərə nisbətən bir elektron çox düşür. GaTe kristalların müəyyən aradılıqla (Te-Ga-Ga-Te-Te-Ga-Ga-Te) atom komponentlərin dörd qatlı laylarını yaradaraq laylı (monoklin) strukturda kristallaşır. Hər bir tetraedrik A kationu üç B anionu və bir A kationu ilə əhatə olunur. Bu birləşmədə müxtəlif növlü atomlar arasındakı kimyəvi qarşılıqlı təsirin təbii sink-sulfid tipli strukturlardakı qarşılıqlı təsire oxşardır. GaTe-un ərimə temperaturu 1097K, sıxlığı 5.55g/cm^3 , p-GaTe birləşməsində akseptorların konsentrasiyası 10^{16}cm^{-3} , onun qadağan zonasının eni mütləq sıfır temperaturda 1.8eV, 80K-də 1.74eV və 300K-də 1.66eV müəyyən olunub [10].

[11] işində laylı yarımkəçirici qallium tellur birləşməsində Raman modulları 10-300K temperaturda $25-300 \text{cm}^{-1}$ tezlik bölməsində öyrənilib. Temperatur artıqca optik fonon xətlərin yunlaşması və genişlənməsi müşahidə olunub. Qəfəs anharmonikliyin üç fononlu proseslər səbəbindən yaranacağı göstərilib.

Abdurahmanov və M.L.Əliyev [12,13] GaSb-GaTe bərk məhlullarda kinetik parametrləri araşdırıb, 99mo.% GaSb+1mo% GaTe kristallarda yükdaşıyıcıların kompensasiyasının başa çatdığını və m^*/m_0 nisbətən azaldığını, tərkibin sonrakı artımında isə artdığını göstərmişlər.

İndiki işdə namin üyüdülmüş GaSb-GaTe bərk məhlulu yüksək təzyiqliq preslayorək yüksək defekt quruluşlu nümunələr almaq, fononların defektlərdən səpilməni gücləndirorək termoelektrik faydalılıq əmsalının artımına nail olmaq məqsədi qoyulub.

EXPERİMENTİN APARILMASI

(GaSb)_{1-x}(GaTe)_x kəsiyində bərk məhlulların alınması üçün Cy-000 markalı sürmə, QL-000 markalı qallium və 40-dəfə zona arıtması ilə təmizlənmiş tellurlardan istifadə olunub. Maddələr dəqiqliyi $2 \cdot 10^{-5}$ q olan analitik tərəzidə çəkilib. Öncə 30q çəkiddə GaSb birləşməsi sintez edilib. Bunun üçün tərəzidə 10.924q Ga və 19.07q Sb elementləri çəkilərək diametri 12mm olan kvarts ampula doldurulub və ampulda 0.1Pa təzyiqliq vakuumu yaradaraq ağzı kiplənilib. Ampul silindirik şəkili sobaya salınıb və 1200K temperaturada qızdırılıb və bu temperaturda 4 saat titrəyisə və 2 saat titrəyisə saxlanılıb. Sonda soba söndürülüb və otmaq temperaturada soyudulub. GaSb-un homogenliyini təmin etmək üçün zona arıtması üsulu ilə 30 dəfə təkrar kristallaşma aparılıb. Alınan kristalda Holl sabiti ölçülüb və deşiklərin konsentrasiyası üçün $5 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$ alınıb. Ga-Sb-Te sistemində 10 qramlıq bərk məhlul almaq üçün (GaSb)_{1-x}(GaTe)_x formulü ilə $x=0.03$; 0.05 və 0.1 tərkiblərə uyğun elementlər analitik tərəzidə çəkilərək ampullara doldurulub. 0.1Pa təzyiqliq vakuumu yaradaraq ağzı kiplənilib, silindirik şəkili sobaya salınıb və 1 saat 1250K temperaturda titrəyisə, daha sonra 6 saat titrəyisiz bu temperaturda saxlandıqdan sonra soyudulub və 900K temperaturda 50 saat saxlanılıb.

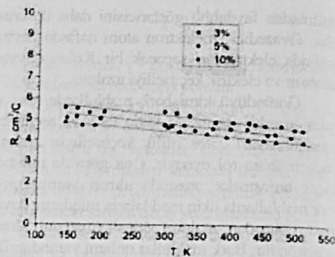
raq tabı alınıb. İkinci mərhələdə sintez olunan ərinti aqat havəində üyüdülərək 100 mikronlu ələkdən keçirilib. Alınmış ovuntu 40MPa təzyiqlə altunda paralelepiped şəkilli polad qəlibdə sıxılaraq bərk hala gətirilib. $15 \times 5 \times 2 \text{mm}^3$ ölçülü nümunələr 50 saat ərzində -800K temperaturda tabı alınaraq homogenləşdirilib.

Elektrik və istilik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi və Holl siqnalı eyni bir tutqacda kompensasiya üsulu ilə ölçülüb. Nümunədə temperatur qradienti yaratmaq üçün onun bir ucuна bifilyar şəkildə konstanta məftil sarınıb. İki konstanta-mis termocütü nümunənin yanına bərkidilib. Bunun üçün termocütün kontakt ucu nümunənin yan üzünə qoyulur və düyün nöqtəsinə gümüş pastası damızdırılır. Nümunənin digər yanına termocütü üz-üzə mis məftil pasta ilə bərkidilir. Pasta quruduqdan sonra, kontaktın möhkəmliliyi üçün onun üzünə BF-2 yapışdırıcı damızdırılır. Termocütün mis qolları həm də termoelektrik hərəkət qüvvəsini və gərginlik düşkəstirini ölçmək üçün istifadə olunur. Holl siqnalı 1.3Tl maqnit sahəsində və $80-550\text{K}$ temperatur aralığında mis məftil və üz-üzə qoyulan termocütün mis qolu ilə ölçülüb.

NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Holl əmsalın temperatur asılılığı 1-ci Şəkilə verilib. Şəkildən göründüyü kimi Holl əmsalı temperaturdan çox zəif asılı olur. Qeyd edək ki, GaSb birləşməsinə Te atomları ilə aşqarlandıqda elektron konsentrasiyası $4 \times 10^{18} \text{sm}^{-3}$ olduğu halda GaSb-GaTe bərk məhlulunda yükdaşıyıcıların maksimum konsentrasiyası $1.4 \times 10^{18} \text{sm}^{-3}$ həddini aşmır. Bu, tellur atomların məhdud şəkildə GaSb-də həll olduğunu göstərir.

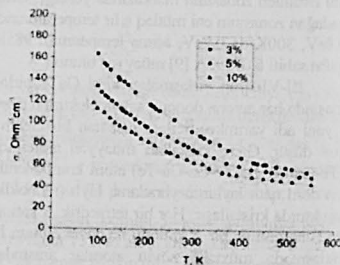
Bərk məhlulda kompensasiya ikinci komponentin müxtəlif faizlərində baş verdiyi halda tellurun eyni konsentrasiyasında (0.01mol%) keçiricilik işarəsini dəyişir. Bu telluridlərin müxtəlif kimyəvi təbiəti ilə və ya kompensasiya prosesində qəfəs vakansiyaların iştirakı ilə bağlı ola bilər. Məlumdur ki, GaSb birləşməsində dəşiklər üçün 10^{17}sm^{-3} -dən aşağı konsentrasiya almaq mümkün deyil və 0.01mol% Te atomları ilə aşqarlandıqda p-tip keçiricilik n-tip keçiriciliyə çevrilir.



Şəkil 1
(GaSb)_{1-x}(GaTe)_x (x=0.03; 0.05; 0.1) bərk məhlulda Holl sabitinin temperatur asılılığı.

Qeyd etmək lazımdır ki, tellur tərkibli GaSb kristallarında Holl əmsalından hesablanan konsentrasiya yükdaşıyıcıların haqiqi qiyməti deyil. GaSb dəşik keçiriciliyinə malik olduğundan Te atomları bir hissəsi dəşiklərin qismən neytrallaşmasına sərf olunur. Bundan əlavə ərimə temperaturundak məxsusi keçiricilik yaranmadığı üçün elektrik keçiriciliyin temperatur asılılığını interpretasiya etmək çətin olur.

2-ci Şəkilə elektrik keçiriciliyin temperatur asılılığı verilib.



Şəkil 2
(GaSb)_{1-x}(GaTe)_x (x=0.03; 0.05; 0.1) bərk məhlulda elektrik keçiriciliyin temperatur asılılığı. Şəkildən görünür ki, temperatur artıqca yükdaşıyıcıların konsentrasiyası qismən artsa da,

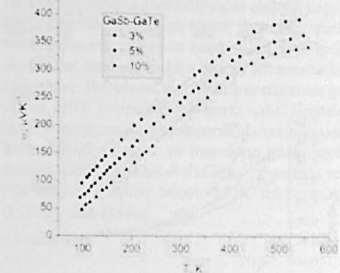
yürtlüklüyün daha çox azalması səbəbindən elektrik keçiriciliyi azalır.

Ərintidə yaranan çoxlu sayda defektlər (ionlaşmış və neytral tellur atomları və vakansiyalar) kristalda potensial sahənin və periodikliyin pozğunluğuna gətirir. Defektlərin və aşqar atomların ətrafında deformasiya sahəsi yaranır və kristal qəfəsi təhrif edir. Bunlar yük daşıyıcıların hərəkətinə və səpilməsinə güclü təsir edir. Elektronların səpilməsi deformasiya potensialından və onun təsir sahəsindən asılı olur. Ərintilərdə əsasən iki cür səpilmə mexanizmi olur: aşağı tərkibdə ionlaşmış atomlardan və yuxarı tərkiblərdə ərintidən səpilmə ola bilər. Onlarda həmçinin ərintidən səpilməyə nisbətən zəif olan istilik rəqslərindən səpilmə də baş verə bilər. Ərintinin nizamsız quruluşundan və akustik fononlardan səpilmə zamanı yük daşıyıcıların sərbəst qaçış yolu onların sürətindən asılı olmur və bu səbəbdən bu iki mexanizmi ayırmaq çətin olur.

Elektronların daha az konsentrasiyası və elektrik keçiriciliyin kiçik qiyməti məhz GaSb birləşməsində kristallik qəfəs periodikliyin güclü şəkildə pozulması ilə bağlıdır. GaTe atomları əlavə olunduqda GaSb qəfəsində periodikliyi pozan əlavə sahə yaranır. Əgər bu sahə aşqar mərkəzlərin aktivasiya enerjisi ilə müqayisə olunacaq dərəcədə və ya ondan çoxdursa, onda donor və ya akseptor səviyyələrin yaranmasına mane olacaq. Ga və Te arasında konsentrasiya nisbətləri GaTe birləşməsində kimyəvi əlaqənin xarakterini müəyyən edir və ona görə də GaSb-a əlavə olunduqda GaTe parçalanacaq, lakin kimyəvi əlaqənin fərqli təbiəti ki, bərk məhlulun fiziki xassələrində özünü göstərəcək.

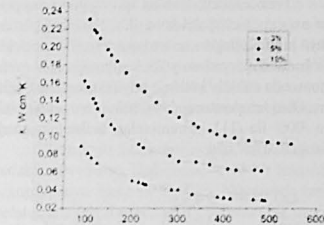
Elektron keçiriciliyə malik GaSb birləşməsinin keçirici zonasında /000/ və /111/ minimumları arasında enerji aralığı otaq temperaturunda 0.07eV olması səbəbindən onda səpilmə mexanizmini araşdırmaq çətin olur. Bu temperaturda hər iki minimum tam dolmuş olur və eksperimental nəticə hər iki minimumda yerləşən elektrona aid olur. Məlumdur ki, /000/ minimumu Brülltən zonasının mərkəzində yerləşir və effektiv kütləsi 0.047m₀, yuxarı /111/ minimumun effektiv kütləsi isə 0.4m₀ olur. Bu səbəbdən elektronların vadilərlə arasından səpilməsi əhəmiyyətli dərəcədə olur.

Termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığı 3-cü Şəkilə verilib. Şəkildən göründüyü kimi S temperatur artıqca artır. Termoelektrik hərəkət qüvvəsinin yüksək qiyməti /111/ minimumunda effektiv kütlənin böyük olması ilə bağlıdır. Otaq temperaturunda bu minimum artıq dolub və /000/ ilə /111/ minimumları arasındakı enerji yayığı 0.07eV olur.

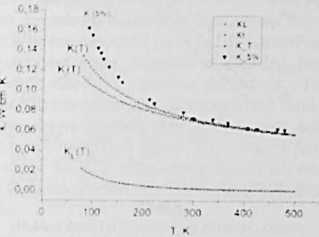


Şəkil 3
(GaSb)_{1-x}(GaTe)_x (x=0.03; 0.05; 0.1) bərk məhlulda termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığı.

4-cü Şəkilə istilik keçiriciliyin temperatur asılılığı verilib. Göründüyü kimi tərkibdən asılı olaraq istilik keçiriciliyi 100K temperaturda 3 dəfə, 500K temperaturda isə 6 dəfə azalır. Temperaturun artması ilə istilik keçiriciliyin ~ 3 dəfə azaldığı görünür. 400K-dən yuxarı temperaturlarda temperatur asılılığı zəifləyir və amorf maddələrin temperatur asılılığına bənzəyir. 5%-li bərk məhlulda istilik müqaviməti $W=0.8 \times 10^{-6} \Omega$, 10%-li bərk məhlulda istilik müqaviməti $W=0.47 \times 10^{-6} \Omega$ asılılığı ilə artır. Defektlərin konsentrasiyası artıqca qəfəs sabiti azalır və bunun nəticəsində qəfəsə potensialın paylanması pozulur. Qəfəsin sıxılması atomları arasındakı qüvvənin anharmoniklik dərəcəsini artırır. Defektlilik dərəcəsi artıqca fononların sərbəst qaçış yolu azalır.



a



b

Şəkil 4

a - (GaSb)_{0.9}+(GaTe)_{0.1} bərk məhlulda istilik keçiriciliyin temperatur asılılığı, b - (GaSb)_{0.9}+(GaTe)_{0.1} bərk məhlulda k(T) asılılığın təcrübi qiymətlərinin hesablanmış nəticələri müqayisəsi. k₁ - uzununa fononların, k₂ - eninə fononların istilik keçiriciliyinə verdiyi pay, k(T) = k₁ + k₂ - tam istilik keçiriciliyi.

Qəfəs rəşələri ilə yaranan istilik keçiriciliyi fononların sərbəstdən və nöqtəvi defektlərdən səpilməsi, həmçinin normal və atılma proseslərin relaksasiya zamanı nəzərə alınaraq 80-500K aralığında üç modal relaksasiya metodu ilə kəmiyyət-cə hesablanmış. Bu zaman istilik keçiriciliyi belə ifadə olunur [14]

$$k_{ph} = \frac{1}{3} k_L + \frac{2}{3} (k_{T1} + k_{T2}), \quad (12)$$

burada k_L - uzununa fononların, k_{T1}/v_{T2} uyğun olaraq aşağı və yüksək tezlikli fononların istilik ke-

çiriciliyinə verdiyi paydır. Bu paylar aşağıdakı kimi ifadə olunur:

Uzununa fononların payı

$$k_L = \frac{k_B}{6\pi^2 v_L} \int_0^{\omega_D} [C + A\omega^4 + (n+1)B_n\omega^2 T^{-1}] \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^2} \omega^3 d\omega, \quad (13)$$

Yüksək və aşağı tezlikli eninə fononların payı

$$k_{T1} = \frac{k_B}{3\pi^2 v_{T1}} \int_0^{\omega_D} [C + A\omega^4 + B_{n1}\omega^2 T^{-1}] \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^2} \omega^3 d\omega, \quad (14)$$

$$k_{T2} = \frac{k_B}{3\pi^2 v_{T2}} \int_0^{\omega_D} [C + A\omega^4 + B_{n2}\omega^2 T^{-1} + B_{n3}\frac{\omega^2}{\sin(z)}] \frac{z^2 e^z}{(e^z - 1)^2} \omega^3 d\omega, \quad (15)$$

burada $z = \hbar\omega / k_B T$, v_L , v_{T1} , v_{T2} - uyğun olaraq rəqs budaqlarında fononun sürəti, ω_1 , ω_2 - Brüllyen zonasının sərhədində aşağı tezlikli və yüksək tezlikli eninə, ω_3 isə uzununa akustik fononların tezliyidir. Hesablamalar matcad-12 proqramı ilə aparılıb və hesablamaların nəticələri Şəkil 4b-də bütün xətlə verilib. Hesablama zamanı seçilmiş parametrlər 1-ci Cədvəldə verilib.

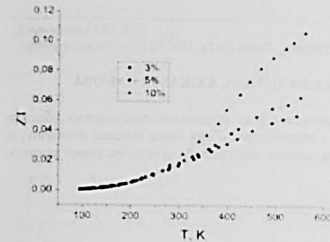
Cədvəl 1

A, s ⁴	B _{n1} , sK ⁻³	B _{n2} , sK ⁻³	C, s ⁴		
8.10 ⁻⁴²	0.6 · 10 ⁻²²	7.51 · 10 ⁻¹⁸	5 · 10 ⁶		
β ₁ , s ⁻¹	β ₂ , s ⁻¹	β ₃ , s ⁻¹	ν _L , sm/san	ν _{T1} , sm/san	ν _{T2} , sm/san
1.38 · 10 ¹¹	1.438 · 10 ¹¹	4.271 · 10 ¹¹	5.24 · 10 ⁸	2.48 · 10 ⁸	0.9 · 10 ⁸

Göründüyü kimi uzununa fononların istilik keçiriciliyinə verdiyi pay çox azdır, yüksək tezlikli eninə fononların verdiyi pay daha çoxdur. 400K temperatura qədər hesablanmış ümumi istilik keçiriciliyi qismən təcrübi nöqtələrə yaxındır. T>400K temperaturalarda fonon prosesləri amorflaşdıqından istilik keçiriciliyi dəyişməz qalır.

Elektrik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi və istilik keçiriciliyin qiymətlərinə əsasən termoelektrik faydalıq əmsali (1) ifadəsi ilə hesablanmış və nəticələr 5-ci Şəkilə verilib. Şəkildən göründüyü kimi temperatur artdıqca ZT sürətlə yüksəlir. 10%-li nümunənin elektrik keçiriciliyi

digər tərkibli nümunələrə nisbətən kiçik olmasına baxmayaraq termoelektrik hərəkət qüvvəsi yüksək, istilik keçiriciliyi isə aşağı olduğuna görə termoelektrik faydalılıq əmsali daha yüksəkdir. Göründüyü kimi, temperatur artdıqca termoelektrik faydalılıq əmsali güclənir və 550K temperaturda onun qiyməti 0,11-ə qədər yüksəlir. Başqa sözlə (GaSb)_{0.9}+(GaTe)_{0.1} termoelektrik maddə kimi yuxarı temperaturlarda istilik enerjisini elektrik enerjisinə çevirən generatorlarda çevirici element kimi istifadə oluna bilər.



Şəkil 5

(GaSb)_{0.9}+(GaTe)_{0.1} (x=0.03; 0.05; 0.1) bərk məhlulda termoelektrik faydalılıq əmsalin temperatur asılılığı.

1. C.Uber, H.J.Goldsmid. *A Comparison of Thermomagnetic Materials For Use of Room Temperature. Journal of Physics D: Applied Physics*, 5 (1972) 1478-1488.
2. G.J.Snyder. *Complex thermoelectric materials, Nature Materials*, 7 (2008) 105-114.
3. Б.М.Аскеров. *Электронные системы переноса в полупроводниках. М.Наука*, (1985).
4. B.Abeles. *Lattice thermal conductivity of disordered semiconductor alloys at high temperatures. Phys. Rev.*, 131 (1963) 1906-1911.
5. J.L.Cui, H.F.Xue, W.J.Xiu. *Microstructures and thermoelectric properties of p-type pseudo-binary Bi-Sb-Te alloys with partial substitution of Ga for Sb prepared by spark plasma sintering. Materials Science and Engineering B*, 135 (2006) 44-49.
6. P.G.Klemens. *Thermal resistance due to point defects at high temperatures. Phys. Rev.*, 119 (1960) 507-509.
7. J.E.Robinson, S.Rodrigues. *Ionized Impurity Scattering in Degenerate Many-Valley Semiconductors. Phys. Rev.*, 135 (1964) A779-784.
8. S.Adachi. *Lattice thermal conductivity of group-IV and III-V semiconductor alloys. J. Appl. Phys.*, 102 (2007) 063502/1-7.
9. T.A.Nilsen, M.Brevik, G.Myrvågnes, B.Fimland. *Thermal expansion of GaSb measured by temperature dependent x-ray diffraction. Journal of Vacuum Science & Technology B*, 28 (2010) 3117-3120.
10. J.L.Brebner, G.Fischer, E.Mooser. *Optical absorption edge of GaTe. J.Phys.Chem.Solids*, 23 (1963) 1417-1421.
11. A.Aydinli, N.M.Gasanly, A.Uka, H.E.foğlu. *Anharmonicity in GaTe layered crystals. Cryst. Res. Technol.*, 37 (2002) 1303-1309.
12. A.Abdurakhmanova, M.I.Aliev. *Electrical Properties of GaSb-Ga2Te₃ and GaSb-GaTe Solid Solution, Phys. stat. sol.*, 17 (1966) 375-380.

NƏTİCƏ

GaSb birləşməsinə GaTe atomları əlavə olunduqda Sb atomlarının Te atomları ilə əvəz olunması kristal qəfəsində periodikliyi pozan əlavə sahə yaradır. Örəntidə yaranan diüyük boşluqları və aşağı atomları kristal qəfəsi təhrif edir. Yaranan deformasiya sahəsi yük daşıyıcıların hərəkətinə və fononların səpilməsinə güclü təsir edir. Temperatur artdıqca səpilmə gücləndiyindən elektrik keçiriciliyi və istilik keçiriciliyi azalır. Yuxarı temperaturda fononların sərbəst qaçış yolu kristal qəfəsin ölçüləri tərtibinə qədər azalır və temperaturdan asılı olur. Bu səbəbdən qəfəsin amorflaşması gedi və istilik keçiriciliyi dəyişməz qalır. Kristalın üyüdülmüş tozundan presləndirək alınan nümunələrdə defektlər çoxalır və fononların güclü səpilməsinə gətirir. (GaSb)_{0.9}+(GaTe)_{0.1} kristalında termoelektrik faydalılıq əmsali 550K temperaturda 0.11-ə qədər yüksəlir.

13. A.A.Abdurakhmanova, M.M.I.Aliev. *On the Mechanism of Thermal Conductivity in $(\text{GaSb})_{2x}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ and $(\text{GaSb})_x(\text{GaTe})_{1-x}$ Solid Solutions*, *Phys. Stat. Sol.* **20** (1967) 777-781.

14. M.G.Holland. *Phonon scattering in semiconductors from thermal conductivity studies*, *Phys. Rev.* **134** (1964) A471-480.

ТЕРМОПОВЕР OF GaSb-GaTe SOLID SOLUTIONS

R.N.RAHIMOV, E.R.MAMMƏDOVA, D.H.ARASLY, A.A.KHALILOVA, A.S.QƏHRƏMANOVA

The Hall coefficients, electrical conductivity, thermal conductivity, and thermo power on the pressed samples of GaSb-GaTe solid solutions have been studied. Thermal conductivity decreased with temperature, and at the higher temperature the amorphization of the phonon system has been observed. It has been shown that at high temperatures the crystals had a high thermoelectric figure of merit.

ТЕРМО-ЭДС ТВЕРДОГО РАСТВОРА GaSb-GaTe

R.N.RAHIMOV, Э.Р.МАМЕДОВА, Д.Г.АРАСЛЫ, А.А.ХАЛИЛОВА, А.С.КАХРАМАНОВА

Изучены коэффициенты Холла, электропроводность, теплопроводность и термо-эдс прессованных образцов твердых растворов GaSb-GaTe. Теплопроводность уменьшается с температурой и при более высоких температурах наблюдается аморфизация фононной системы. Показано, что при высоких температурах кристаллы имеют высокую термоэлектрическую добротность.