

UOT 536.413-541.661

LAYLI VƏ ZƏNCİRVARİ QURULUŞLU YARIMKEÇİRİCİLƏRİN TERMODİNAMİK PARAMETRLƏRİNİN TEMPERATUR ASILILIQLARINDA DEBAY FUNKSİYASININ ROLU

¹QURBANOV MEHDİ MƏHƏMMƏD oğlu

²MƏMMƏDOV FUAD ƏZİZ oğlu

³MƏMMƏDOV SƏMƏNDƏR CƏFƏR oğlu

⁴QOCAYEV MURĞUZ MUĞAN oğlu

Sumqayıt Dövlət Universiteti, 1,2,3,4 - dosent

mehti.qurbanov@bk.ru

Açar sözlər: istidən genişlənmə əmsalı, Debay temperaturu, Debay funksiyası, orta enerji, termodinamika, halkogenid.

Mövcud ədəbiyyatlarda göstərilmişdir ki, bərk cisimlərdə bir sıra termodinamik parametrlərin temperatur asılılıqlarını müəyyən edən zaman Debay xarakteristik temperaturu (θ) ilə bərabər Debay funksiyası $D(\theta/T)$ da əsas rol oynayır [1].

Yüksək temperatur oblastında ($T \gg \theta$) bərk cismin orta enerjisi yalnız temperaturla təyin olunur.

$$E = 3KNT \quad (1)$$

Burada K-Bolsman sabiti, N-kristalda olan elementar özləklərin, yaxud atomların sayı, T-mütləq temperaturudur.

Bərk cisimlərin istilik tutumuna aid Debay modeli əsasında hesablanmış orta enerjisi isə

$$E = 3KNTD\left(\frac{\theta}{T}\right) \quad (2)$$

düsturu ilə təyin olunur.

Burada

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = 3\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (3)$$

Debay funksiyası adlanır.

Göründüyü kimi, kristalın ixtiyari temperaturdakı enerjisi (1) düsturunda verilən enerjinin qiymətindən Debay funksiyası vuruğu ilə fərqlənir. Digər bir ədəbiyyatda Debay funksiyasının qiyməti belə düstur şəklində hesablanmışdır [2].

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{1}{(\theta/T)} \int_0^{\theta/T} (e^x - 1)^{-1} x dx \quad (4)$$

(3) düsturuna əsasən hesablama apararkən inteqralları ifadə sıraya ayrılmış ($T \gg \theta$), ($T \ll \theta$) və aralıq temperatur inteqralları üçün Debay funksiyasının asimptotikaları araşdırılmışdır.

Bu halda yüksək temperatur oblastında ($T \gg \theta$) Debay funksiyasının asimptotikası üçün

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = 1 - \frac{3}{8}\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{20}\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \quad (5)$$

qiyməti, aşağı temperatur intervalında isə ($T \ll \theta$)

$$D\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \quad (6)$$

alınmışdır.

Bu ədəbiyyatda həmçinin aralıq temperatur hallarında istifadə oluna biləcək $\int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1}$ – inteqralı üçün $\frac{\pi^2}{6}$ – qiymətinin alındığı göstərilmişdir.

Mövcud ədəbiyyatda (4) ifadəsindən bütün temperatur intervalında Debay funksiyasının qiymətləri hesablanıb cədvəl şəklində verilmişdir (cədvəl 1). Burada $\frac{\theta}{T} \geq x \geq 0$ götürülmüşdür.

Cədvəl 1.

θ/T	$D(\theta/T)$	θ/T	$D(\theta/T)$	
1	0,778	1,2	0,740	
0,8	0,848	1,4	0,704	
0,6	0,860	2	0,607	
0,4	0,905	2,5	0,540	
0,2	0,931	3	0,487	
		5	0,321	
		6	0,371	
		8	0,205	

Qeyd etmək lazımdır ki, yuxarıda qeyd olunan işlərdə istilik parametrlərinin temperatur asılılıqları üçün əsasən Debay modelinin nisbətən yaxşı ödənilməsi hallar götürülmüşdür. Laylı və zəncirvari quruluşda kristallaşan mürəkkəb yarımkeçirici birləşmələr üçün Debay funksiyasının cədvəl 1-də verilən qiymətlərindən istifadə etməyin mümkün olmasını araşdırmaq maraq doğurur.

Bu işdə qallium və indium monohalkogenidlərinin istilik parametrlərinin eksperimental qiymətləri əsasında hesablanmış Debay funksiyası və onun ədəbiyyatdan mövcud olan qiymətlərlə müqayisəsi aparılmışdır.

Qallium və indium monohalkogenidləri üçün Debay xarakteristik temperaturu (θ), həmin birləşmələrin istidən genişlənmə əmsallarının eksperimental qiymətlərindən istifadə etməklə ədəbiyyatdan mövcud olan empirik düstur əsasında hesablanmışdır [3].

$$\theta = \frac{19,37}{(\bar{A} \cdot V^{2/3} \alpha)^{1/2}} \quad (7)$$

Burada $\bar{A}$ -ortakkvadratik atom kütləsi, α -istidən xətti genişlənmə əmsalı, V -atomar həcmidir.

Tədqiq olunan birləşmələr üçün istidən xətti genişlənmə əmsalı təcrübi olaraq təyin edilmişdir. Bu halda təcrübənin nisbi xətası 0,5 % olmuşdur [4, 5]. Bütün birləşmələr üçün müxtəlif temperatur intervalında α və θ -nin qiymətləri cədvəl 2 və cədvəl 3-də verilmişdir.

Bu birləşmələr üçün θ/T -nin qiymətləri də həmin cədvəllərdə verilmişdir.

Cədvəl 1-də verilmiş qiymətlərlə müqayisə aparmaq məqsədilə qallium və indium halkogenidləri üçün də Debay funksiyasının hesabat (4) düsturu əsasında aparılmış və alınan nəticələr də cədvəllərdə verilmişdir.

Bu hesablamaların aparılması zamanı (4) düsturuna daxil olan integralin qiyməti üçün ədəbiyyatda verilmiş

$$k = \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6} \quad (8)$$

qiymətindən istifadə edilmişdir. Burada integralın açılışında Qamma funksiya və Riman funksiyasının hasili götürülmüşdür [1].

Cədvəllərdən göründüyü kimi, qallium və indium halkogenidlərində Debay xarakteristik temperaturu azalan halda da, başqa sözlə, GaS-dən GaTe-a getdikcə və eləcə də InS-dən InTe-a getdikcə Debay funksiyasının qiyməti artır.

Alınan qiymətlərin Debay funksiyasının ədəbiyyatdan mövcud olan cədvəl qiymətləri ilə müqayisəsi göstərmişdir ki, (7)-düsturunda verilən qiymətlər əsasında aparılmış hesablamalarda (θ/T)-nin qiymətləri kiçik olan hallarda ($\theta/T \leq 2$), onun azalması ilə kənaraçıxma daha çox olur.

Cədvəl 2

GaS						GaSe						GaTe					
T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$	T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$	T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$
150	6,68	7,37	435	2,9	0,465	150	6,85	9,97	334	2,23	0,596	150	7,07	9,98	259	1,73	0,770
170	6,81	7,54	434	2,55	0,522	170	6,89	10,02	335	1,97	0,675	170	7,21	10,05	260	1,53	0,866
180	6,93	7,65	439	2,45	0,543	180	6,98	10,05	334	1,86	0,715	180	7,47	10,14	261	1,45	0,923
200	7,02	8,12	450	2,25	0,591	200	7,38	10,08	334	1,67	0,796	200	7,92	10,21	272	1,36	0,975
220	7,14	8,33	436	1,98	0,673	220	7,41	10,09	333	1,52	0,878	220	7,95	10,24	272	1,24	1,075
240	7,49	8,45	430	1,79	0,743	240	7,43	10,11	331	1,38	0,965	240	7,96	10,28	271	1,13	1,176
260	7,12	8,68	426	1,64	0,811	260	7,49	10,14	325	1,25	1,066	260	8,05	12,54	255	0,98	1,360
280	7,21	8,79	417	1,49	0,894	280	7,51	10,17	308	1,10	1,211	280	8,14	12,86	242	0,86	1,543
300	7,25	9,00	402	1,34	0,993	300	7,56	10,25	310	1,03	1,470	300	8,26	13,21	249	0,83	1,600

Cədvəl 3

InS						InSe						InTe					
T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$	T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$	T, K	$\alpha_{II} \cdot 10^6, 1/K$	$\alpha_{I, \infty} \cdot 10^6, 1/K$	θ, K	θ/T	$D(\frac{\theta}{T})$
150	7,05	9,48	352	2,35	0,872	150	8,94	11,2	246	1,64	0,964	150	8,82	10,75	230	1,53	1,034
170	7,82	10,37	349	2,05	0,770	170	9,90	12,4	235	1,38	1,014	170	9,95	12,01	228	1,34	1,180
180	8,17	10,76	352	1,96	0,791	180	10,2	12,9	227	1,26	1,032	180	10,41	12,60	226	1,25	1,316
200	8,76	11,50	349	1,74	0,908	200	10,8	13,7	225	1,12	1,045	200	11,25	13,55	225	1,12	1,411
220	9,35	12,15	354	1,61	0,989	220	11,3	14,3	223	1,01	1,156	220	11,67	14,00	221	1,01	1,567
240	9,82	12,75	352	1,64	1,082	240	11,6	14,8	219	0,91	1,245	240	12,31	14,75	216	0,90	1,678
260	10,25	13,31	353	1,36	1,163	260	12,0	15,3	213	0,82	1,326	260	13,25	15,80	210	0,81	1,679
280	10,60	13,80	335	1,20	1,318	280	12,2	15,7	209	0,75	1,548	280	13,65	16,12	205	0,73	1,682
300	10,83	14,19	295	0,98	1,615	300	12,4	16,0	198	0,66	1,615	300	14,00	16,42	195	0,65	1,691

Qeyd etmək lazımdır ki, Debay funksiyası da Eynşteyn funksiyası kimi $0 \leq T \leq \infty$ oblastında $0 \div 1$ intervalında qiymətlər alır. Başqa sözlə, $D(\theta/T) = \begin{cases} 0; T \rightarrow 0 \\ 1; T \rightarrow \infty \end{cases}$

Temperaturun həmin oblasta uyğun gələn qiymətləri üçün ədəbiyyat [1]-də verilmiş

$$D(\theta/T) = 1 - \frac{3}{8}(\theta/T) + \frac{1}{20}(\theta/T)^2 \quad (9)$$

düstur əsasında hesabat apardıqda cədvəl 1-də verilmiş qiymətlərə daha yaxın qiymətlər alınmışdır.

Qallium və indium monohalkogenidləri üçün (9) düsturu əsasında hesablanmış qiymətlər cədvəl 4 və cədvəl 5-də verilmişdir.

Aparılan araşdırmalar göstərmişdir ki, laylı və zəncirvari quruluşlu mürəkkəb yarımkəçirici birləşmələr üçün də termodinamik parametrlərin hesabı zamanı çox kiçik xəta ilə cədvəl 1-də verilmiş qiymətlərdən istifadə etmək olar. Bu halda meydana çıxan kənarçıxmaları istilik parametrlərinin eksperimental qiymətlərində və Debay xarakteristik temperaturunun hesabında yaranan xətalara əlaqələndirmək olar.

Debay funksiyasının hesabı üçün ədəbiyyat [1]-də verilmiş qiymətlərdən çox aşağı ($T \ll \theta$) və çox yüksək ($T \gg \theta$) temperatur intervallarında istifadə etmək olar.

Cədvəl 4.

GaS			GaSe			GaTe		
T, K	θ/T	$D(\theta/T)$	T, K	θ/T	$D(\theta/T)$	T, K	θ/T	$D(\theta/T)$
150	2,9	0,333	150	2,23	0,412	150	1,73	0,501
170	2,55	0,369	170	1,97	0,456	170	1,53	0,544
180	2,45	0,382	180	1,86	0,475	180	1,45	0,562
200	2,25	0,410	200	1,67	0,513	200	1,36	0,572
220	1,98	0,454	220	1,52	0,545	220	1,24	0,611
240	1,79	0,489	240	1,38	0,578	240	1,13	0,640
260	1,64	0,519	260	1,25	0,610	260	0,98	0,681
280	1,49	0,553	280	1,10	0,648	280	0,86	0,714
300	1,34	0,587	300	1,03	0,667	300	0,83	0,723

Cədvəl 5.

InS			InSe			InTe		
T, K	θ/T	$D(\theta/T)$	T, K	θ/T	$D(\theta/T)$	T, K	θ/T	$D(\theta/T)$
150	2,35	0,405	150	1,64	0,519	150	1,53	0,544
170	2,05	0,442	170	1,38	0,578	170	1,34	0,578
180	1,96	0,457	180	1,26	0,607	180	1,25	0,610
200	1,74	0,499	200	1,12	0,642	200	1,12	0,642
220	1,61	0,526	220	1,01	0,673	220	1,01	0,673
240	1,46	0,559	240	0,91	0,700	240	0,90	0,703
260	1,36	0,579	260	0,82	0,726	260	0,81	0,729
280	1,2	0,670	280	0,75	0,747	280	0,73	0,753
300	0,98	0,681	300	0,66	0,774	300	0,65	0,778

ƏDƏBİYYAT

1. Əsgərov B.M. Termodinamika və statistik fizika. Bakı: Bakı Universiteti, 2005, 625 s.
2. Францевич Н.Н. Упругие постоянные металлов и сплавов // Вопросы порошковой металлургии и прочности материалов. Вып. 3, Киев: Издательство АН УССР, 1956, 22 с.
3. Курбанов М.М. Тепловое расширение и изотермическая сжимаемость TlGaSe_2 // Неорганические материалы. т.37, №12. М., 2001, с. 1447-1448

4. Алиев Н.Г., Керимов И.Г., Мамедов Т.А. Анизотропия линейного теплового расширения и изотермической сжимаемости халькогенидов и теллурида галлия. Химическая связь в полупроводниках и полуметаллах. Минск: Наука и техника, 1972, с. 313-318
5. Алиев Н.Г., Керимов И.Г., Курбанов М.М. Тепловое расширение и изотермическая сжимаемость монокристаллов халькогенидов индия // Физика твердого тела. СПб.: Наука, 1972, с. 3707-3710

РЕЗЮМЕ

РОЛЬ ДЕБАЕВСКОЙ ФУНКЦИИ В ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ СО СЛОИСТОЙ И ЦЕПНОЙ СТРУКТУРОЙ

Курбанов М.М., Мамедов Ф.А., Мамедов С.Д., Годжаев М.М.

Ключевые слова: коэффициент теплового расширения, температура Дебая, функция Дебая, средняя энергия, термодинамика, халькогенид.

На основе экспериментальных данных по тепловому расширению проведены расчеты дебаевской характеристической температуры (θ) и дебаевской функции $D(\theta/T)$ для монокхалькогенидов галлия и индия. Показано, что значение данной функции, вычисленные на основе дебаевской модели, не пригодны для соединений, кристаллизующихся в слоистых и цепочных структурах. Для сложных полупроводниковых соединений, кристаллизующихся в слоистой и цепочной структуре, больше подходят значения, получающиеся при разложении в ряд подинтегрального выражения, входящего в формулу для вычисления дебаевской функции. Дебаевские функции, имеющиеся в литературе, можно использовать только при значительно низких и высоких температурах.

SUMMARY

THE ROLE OF THE DEBAY FUNCTION IN THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THERMODYNAMIC PARAMETERS OF LAYERED SEMICONDUCTORS AND CHAIN STRUCTURE

Gurbanov M.M., Mammadov F.A., Mammadov S.J., Qojayev M.M.

Key words: coefficient of thermal expansion, Debye temperature, Debye function, average energy, thermodynamics, chalcogenide.

Based on the experimental data on thermal expansion, the Debye characteristic temperature (θ) and the Debye function $D(\theta/T)$ for gallium and indium monochalcogenides have been calculated. It was shown that the values of this function calculated on the basis of the Debye model are not suitable for compounds crystallizing in layered and chain structures. For complex semiconductor compounds crystallizing in a layered and chain structure, the values obtained by expanding into a series the integrand in the formula for calculating the Debye function are more suitable. The Debye functions available in the literature can be used only at significantly low and high temperatures.

Daxilolma tarixi:	İlkin variant	24.12.2019
	Son variant	12.02.2020