Georgian Scientists

ქართველი მეცნიერები

Vol. 6 Issue 1, 2024

https://doi.org/10.52340/gs.2024.06.01.21

სილიციუმ-გერმანიუმის შენადნობის თერმოელექტრული მახასიათებლების დამოკიდებულება მასალის განზოგადოებულ პარამეტრსა და ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორზე

რაფიელ თხინვალელი,[1] ზურაბ ადამია,[2,3] ლაშა ლორია,[4] ირაკლი ნახუცრიშვილი[1]

[1]საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის კიბერნეტიკის ინსტიტუტი; [2]სოხუმის ფიზიკისა და ტექნოლოგიის ინსტიტუტი [3]საქართველოს უნივერსიტეტი; [4]თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რეზიუმე

განხილულია სილიციუმ-გერმანიუმის შენადნობის განზოგადოებული პარამეტრი B*. შესწავლილია მასალის ფაზური შემადგენლობის (Si_xGe_{1-x}, x=0.7, 0.72, 0.76, 0.8 და 0.83) გავლენა აღნიშნულ პარამეტრზე ოთახის ტემპერატურასთან მიახლოვებულ პირობებში. ასევე აგებულია დამოკიდებულება ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორსა და განზოგადოებულ პარამეტრს შორის. მიღებულია ფორმულა, რომელიც პირდაპირ აკავშირებს მასალის განზოგადოებულ პარამეტრს ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორთან Si_xGe_{1-x}-ის მოცემული შემადგენლობისათვის.

საკვანძო სიტყვები: Si_xGe_{1-x} შენადნობი, თერმოელექტრული მასალის განზოგადოებული პარამეტრი, ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორი.

შესავალი

თერმოელექტრული მასალებით ხორციელდება პირდაპირი კონვერტაცია სითბურ და ელექტრულ ენერგიებს შორის. ამ მასალების ძირითადი მახასიათებელია თერმოელექტრული ვარგისიანობის ფაქტორი $ZT = S^2\sigma T/\kappa$, სადაც S, T, σ და κ შესაბამისად ზეებეკის კოეფიციენტი, აბსოლუტური ტემპერატურა, ხვედრითი ელექტროგამტარობა და სითბოგამტარობის კოეფიციენტია.

ბოლო ათწლეულში შემუშავებულ იქნა ახალი მიდგომები ტრადიციული ZT-ს დასახასიათებლად. კერძოდ შემოღებულ იქნა ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორისა (B_E) და თერმოელექტრული მასალის განზოგადოებული პარამეტრის (B*)(1) ცნებები [1,2]. ეს უკანასკნელი მოიცემა ფორმულით:

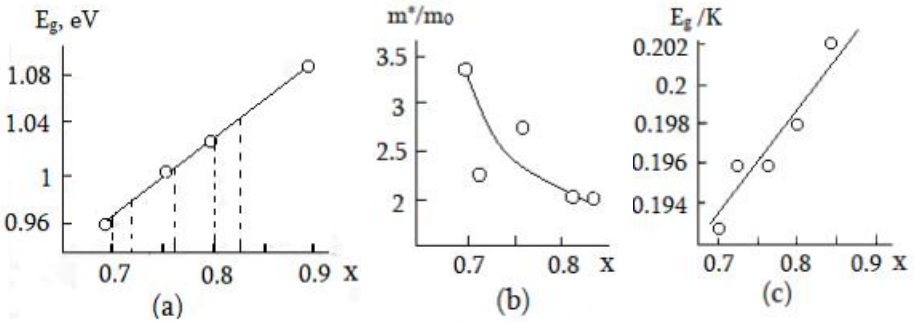
$$B^{*}=6.668\cdot10^{-2}\frac{U^{*}}{k}E_g, \quad (1)$$

სადაც $U^{*}=\mu(Tm^{*}/m_0)^{3/2}$ (μ და m^{*} - მუხტის მატარებელთა ძვრადობა და ეფექტური მასა, m_0 - ელექტრონის უძრაობის მასა, E_g - აკრძალული ზონის სიგანე). B^{*}-ში ურთიერთდაკავშირებულია ეს სამი ფუნდამენტური პარამეტრი (U^{*}, κ, და E_g), რომლებიც მოქმედებენ ZT-ზე.

წინამდებარე ნაშრომში განხილულია სილიციუმ-გერმანიუმის შენადნობის B^{*}, B_E და ZT პარამეტრები (ეს შენადნობი ფართოდ გამოიყენება მეცნიერებისა და ტექნიკის სხვადასხვა დარგში, მათ შორის თერმოელექტრობაში). კერძოდ, შესწავლილია ფაზური შემადგენლობის (Si_xGe_{1-x}, x=0.7, 0.72, 0.76, 0.8 და 0.83) გავლენა აღნიშნულ პარამეტრებზე (300-306)^{o}K ტემპერატურებზე. გამოთვლილია აგრეთვე ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორი B_E და ზოგიერთი სხვა თერმოელექტრული მახასიათებელი.

მეთოდოლოგია

საკვლევი მასალის დოპირება ხდებოდა ფოსფორით N-ტიპის გამტარებლობის მისაღებად; მუხტის მატარებელთა კონცენტრაცია შეადგენდა $n=3.2\cdot10^{26}$მ$^{-3}$-ს; ძვრადობა და თბოგამტარობის კოეფიციენტი განისაზღვრებოდა ექსპერიმენტალურად; ეფექტური მასები კი გამოითვლებოდა თეორიულად (იხ. დამატება და ნახ.5ბ); აკრძალული ზონის სიგანის სიდიდის განსასაზღვრელად გამოვიყენეთ ნაშრომ [3]-ში მოყვანილი E_g - x დამოკიდებულება (ნახ.1), საიდანაც ვახდენდით ექსტრაპოლაციას x-ის საკვლევი მნიშვნელობებისაკენ. E_g-ს ზრდა მასალაში გერმანიუმის შემცველობის შემცირებით შეიძლება აიხსნას გერმანიუმის ატომის ელექტრონულ კონფიგურაციაში შევსებული $3d^{10}$ გარსის გავლენით.

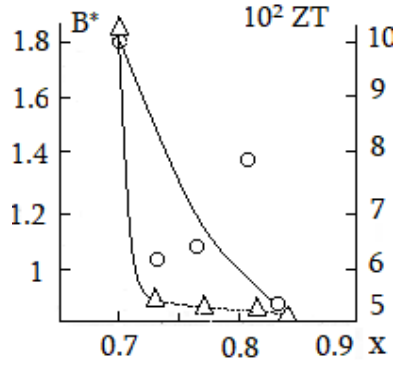


ნახ.1. (a) E_g - x დამოკიდებულება ოთახის ტემპერატურისათვის [3], (b) m^{*}/m_0 - x და (c) E_g/k - x დამოკიდებულებები იმავე ტემპერატურაზე.

შედეგების განხილვა

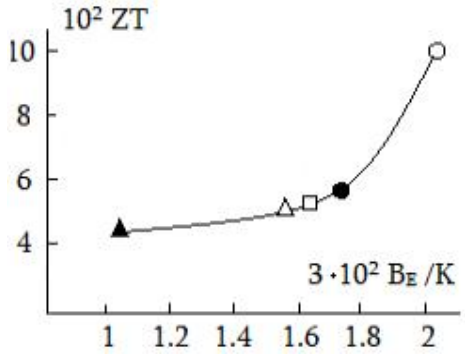
ნახ.2-ზე მოყვანილია B^{*} - x და ZT - x დამოკიდებულებები Si_xGe_{1-x}-სათვის. ნახაზზე ნაჩვენებმა ZT-ს სიდიდეებმა (~0.05-0.1) არ უნდა გვაფიქრებინოს, რომ SiGe შენადნობი დაბალი

თერმოელექტრული ვარგისიანობისაა: ამ მასალისათვის ZT აღწევს ~0.6-ს P-ტიპის ნიმუშებისათვის და ~0.8-ს N-ტიპისათვის, რაც დაახლოებით 940°C-ზე იჩენს თავს [4,5].



ნახ.2. B^* - x (o) და ZT - x (Δ) დამოკიდებულებები.

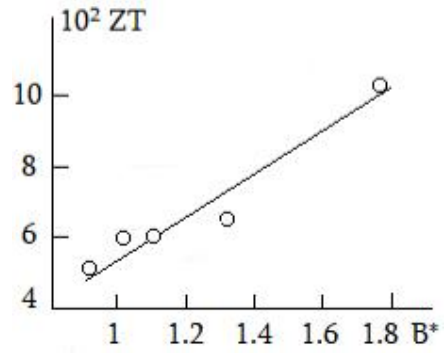
ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორი მოიცემა გამოსახულებით $B_E=\sigma S^2/B_S$, სადაც $B_S=S_r\left[\frac{S_r e^{(2-S_r)}}{1+e^{-5(S_r-1)}}+\frac{\pi^2}{3[1+e^{5(S_r-1)}]}\right]$ არის სიმძლავრის მასშტაბირებული ფაქტორი, ხოლო S_r - ზეებეკის დაყვანილი კოეფიციენტი: $S=(q_e/k_B)S\cong 1.16\cdot 10^4 S$ (q_e - ელემენტარული მუხტი, k_B - ბოლცმანის მუდმივა). [1]-ში მოყვანილია ოთახის ტემპერატურაზე ZT-ს მაქსიმლური სიდიდის დამოკიდებულება კომბინაცია $B_E T/k$-ზე სხვადასხვა თერმოელექტრიკული მასალისათვის. ნახ.3-ზე წარმოდგენილია ჩვენი მონაცემები, გამოთვლილი Si_xGe_{1-x}-ის ყველა საკვლევი შემადგენლობისათვის.



ნახ.3. ZT - $300B_E/k$ დამოკიდებულებები Si_xGe_{1-x}-სათვის: x=0.7 (o), 0.72 (Δ), 0.76 (□), 0.8 (●) და 0.83 (▲).

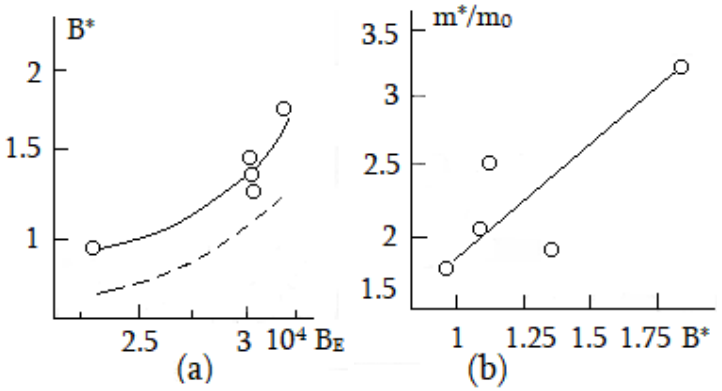
აქაც უნდა გავიმეოროთ, რომ ZT-ს მოყვანილი მნიშვნელობები არ წარმოადგენს ამ პარამეტრის მაქსიმალურ სიდიდეებს. პირიქით: ეს მნიშვნელობები ყველაზე უფრო მცირეა ცალკეული ნიმუშისათვის ტემპერატურის საკვლევ ინტერვალში.

ნახ.4-ზე მოყვანილია დამოკიდებულება ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორსა და განზოგადოებულ პარამეტრს შორის. როგორც ნახაზიდან ჩანს, იგი პრაქტიკულად წრფივია. ZT - B^* დამოკიდებულების წრფივობა ნაჩვენებია [2]-ში ცვლადების უფრო მაღალი მნიშვნელობებისათვის.



ნახ.4. ZT- B* დამოკიდებულება.

ბოლოს მოვიყვანოთ დამოკიდებულება უშუალოდ მასალის განზოგადოებულ პარამეტრსა და ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორს შორის (ნახ.5).



ნახ.5. (a) B*- B_E და (b) m^*/m_0 - B* დამოკიდებულებები. წყვეტილი ხაზი - ფორმულა (2)-ის მიხედვით.

ამ პარამეტრთა გამოსახულებების კომბინაციათა მარტივი გარდაქმნით მივიღებთ: $B^* \cong 1.544\cdot 10^4 E_g B_E/k$, რაც ნიშნავს იმას, რომ

$B^* \cong (0.088x+0.238)\cdot 10^4 B_E$ (2) (იხ. სტრიქონსქვედა შენიშვნა[2]). ეს ფორმულა მოსახერხებელია იმ თვალსაზრისით, რომ პირდაპირ აკავშირებს მასალის განზოგადოებულ პარამეტრს ელექტრონული ვარგისიანობის ფაქტორთან Si_xGe_{1-x}-ის მოცემული შემადგენლობისათვის.

დამატება

მუხტის მატარებელთა ეფექტური მასების გამისათვლელად გამოვიყენეთ შემდეგი ფორმულა [6]:

$$\frac{m^*}{m_0} \cong 1.059\cdot 10^{-15}\left(\frac{n^{2/3}}{T}\right)\left\{\frac{3\left[e^{(S_r-2)}-0.17\right]^{2/3}}{1+e^{-5(S_r-S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1+e^{5(S_r-S_r^{-1})}}\right\} \cong \frac{6.608\cdot 10^{-15}}{T}\left[ne^{(S_r-2)}\right]^{2/3}. \quad (3)$$

კონცენტრაციისა და ტემპერატურის სიდიდეთა გათვალისწინებით განტოლება (3) მიიღებს სახეს: $m^*/m_0 \cong 0.816(e^{S_r-2})^{2/3}$ (იხ. ნახ.1b-ზე მოყვანილი m^*/m_0 - x დამოკიდებულება).

სტრიქონსქვედა შენიშვნები:

(1) ამ სიდიდეს უწოდებენ აგრეთვე ვარგისიანობის (პირველად) ეფექტურ პარამეტრს.

(2) E_g/k - x დამოკიდებულების წრფივობიდან (ნახ.1c) გამოდის, რომ $E_g/k \cong 0.057x+0.154$.

დასკვნა

განხილულია სილიციუმ-გერმანიუმის შენადნობის (Si_xGe_{1-x}, x=0.7, 0.72, 0.76, 0.8 და 0.83) B*, B_E და ZT პარამეტრები. გაანალიზებულია E_g - x, B^* - x, ZT - x, m^*/m_0 - x, B_E - B^* და m^*/m_0 - B^* დამოკიდებულებები.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. X.Zhang, Z.Bu et al. Electronic quality factor for thermoelectrics. Science Advances, 2020, 6, eabc0726.

2. W.Liu, J.Zhou et al. New insight into the material parameter B to understand the enhanced thermoelectric performance of $Mg_2Sn_{1-x-y}Ge_xSb_y$. Energy Environm. Sci., 2016, 9, 530-539.

3. A.M.Al-sheikh, M.M.Hussien, S.J.Abdullah. Pressure and temperature dependence of energy gap in SiC and $Si_{1-x}Ge_x$. Raf. Sci., 2019, 28, 53-61.

4. G.Bokuchava, K.Barbakhadze, I.Nakhutsrishvili. Thermoelectric parameters of alloy p-$Si_{0.7}Ge_{0.3}$. Bull. Georg. Acad. Sci., 2023, 17, 33-37.

5. G.Bokuchava, K.Barbakadze, I.Nakhutsrishvili. On the thermoelectric alloy n-Si_xGe_{1-x}. Material Sci. & Engin., 2023, 7, 54-57.

6. G.J.Snyder, A.Pereyra, R.Gurunathan. Effective mass from Seebeck coefficient. Adv. Funct. Materials. 2022, 32, 2112772.

Dependence of the Thermoelectric Characteristics of the Silicon-Germanium Alloy on the Generalized Parameter of the Material and Electronic Quality Factor

Rafiel Tkhinvaleli,[1] Zurab Adamia,[2,3] Lasha Loria,[2] Irakli Nakhutsrishvili[1]

[1]Institute of Cybernetics of Georgian Technical University; [2]Sukhumi Institute of Physics and Technology; [3]University of Georgia; [4]Tbilisi State University

Summary

The generalized parameter B* of silicon-germanium alloy is discussed. The influence of the phase composition of the material (Si_xGe_{1-x}, x=0.7, 0.72, 0.76, 0.8 and 0.83) on the mentioned parameter under conditions close to room temperature has been studied. The relationship between the electronic quality factor and the generalized parameter is also constructed. A formula has been obtained ($B^* \cong (0.088x+0.238)\cdot 10^4 B_E$) that directly relates the generalized material parameter to the electronic correspondence coefficient for a given composition of Si_xGe_{1-x}.

Keywords: Si_xGe_{1-x} alloy, generalized parameter of thermoelectric material, electronic quality factor.