

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI

Əlyazması hüququnda

(AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} BƏRK MƏHLULLARININ TERMOELEKTRİK XASSƏLƏRİ

İxtisas: 2220.01-Yarımkeçiricilər fizikası

Elm sahəsi: Fizika

İddiaçı: **Aynur Arif qızı Səddinova**

Fəlsəfə doktoru elmi dərəcəsi
almaq üçün təqdim edilmiş dissertasiyanın

AVTOREFERATI

Bakı-2021

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun "Spektroskopik ellipsometriya" laboratoriyasında yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbər: Fizika elmləri doktoru, dosent
Sədiyar Soltan oğlu Rəhimov

Rəsmi opponentlər: Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Dürdanə Həmid qızı Araslı

Fizika elmləri doktoru, professor
Müsavər Abdusalam oğlu Musayev

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Yusif Quşu oğlu Nurullayev

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında Ali Attestasiya Komissiyasının Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurası

Dissertasiya şurasının sədri:

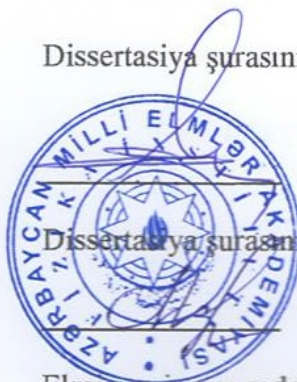
AMEA-nın həqiqi üzvü,
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor
Nazim Timur oğlu Məmmədov

Dissertasiya şurasının elmi katibi:

Fizika elmləri doktoru, dosent
Rəfiqə Zabil qızı Mehdiyeva

Elmi seminarın sədri:

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, dosent
Tələt Rzaqulu oğlu Mehdiyev



İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı və işlənmə dərəcəsi. Müasir texnikanın və texnologiyaların inkişafı daima daha səmərəli elektrik enerjisi mənbələrinin hazırlanmasını və təkmilləşdirilməsini tələb edir. Son zamanlar elektrik enerjisi mənbələri üçün qoyulan əsas tələblərdən biri yüksək effektivliklə yanaşı, onların ekoloji cəhətdən də səmərəli olmasıdır. İstehsal olunan enerji bərpa olunmalı və ətraf mühitə mənfi təsir göstərməməlidir. İnkişafın perspektivli istiqaməti Zeebek effekti əsasında işləyən və istilik enerjisinin birbaşa elektrik enerjisinə çevrilməsini həyata keçirən termoelektrik generatorların geniş tətbiqi hesabına, termoelektrik emalının sənayedə istifadə edilməsidir. Müasir termoelektrik generatorların mühüm çatışmazlığı istilik enerjisinin elektrik enerjisinə çevrilmə əmsalının kiçik olması, yəni ~8%-dən çox olmaması və termoelektrik generatorlarda istifadə olunan, eyni zamanda, böyük elektrikkeçirməyə, termoe.h.q-ə və kiçik istilikkeçirməyə malik olan termoelektrik materialın, yəni yarımkeçiricinin xassələri ilə məhdudlaşmasıdır. Yarımkeçiricinin bu xassələri onun ZT termoelektrik keyfiyyətliyini və ya termoelektrik effektivliyini artırmaq məqsədilə, yeni elmi və texnoloji yanaşmaların axtarışını və işlənilib hazırlanmasını müəyyən edir.

Bu məqsədlə, son zamanlar, həm materialların strukturunun dəyişdirilməsi, həm də tərkibin və termoelektrik xassələrin müxtəlif elementlərlə aşqarlamaqla və ya ilkin materiallar əsasında yeni bərk məhlulların və kimyəvi birləşmələrin yaradılmasının köməyi ilə optimallaşdırılmasından istifadə olunur. Bu halda, elektrikkeçirməni yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını dəyişməklə, istilikkeçirməni isə xüsusi defektli quruluş yaratmaqla idarə etmək olar.

$A^I B^V C^{VI}$ qrupuna aid üçqat yarımkeçirici birləşmələr, əsasən, çox kiçik istilikkeçirməyə malik olmaları ilə əlaqədar olaraq, termoelektrik material kimi böyük maraq kəsb edirlər. Bu qrupa aid olan $AgSbTe_2$ və $AgSbSe_2$ birləşmələrinin istilikkeçirməsinin qiymətinin digər termoelektrik maddələrlə müqayisədə daha az olması, onları tətbiq nöqtəyi-nəzərdən daha cəlbedici material edir.

Qeyd etmək lazımdır ki, $A^I B^V C^{VI}$ qrupuna aid olan $AgSbTe_2$ birləşməsinin $GeTe$ və $PbTe$ əsasında alınmış bərk məhlullarında

həm termoelektrik, həm də qalvanomaqnit xassələr böyük temperatur intervalında kifayət qədər geniş tədqiq olunmuşdur.

AgSbSe₂ əsasən, otaq temperaturundan yuxarı temperaturalarda, termoelektrik xassələrinin öyrənilməsi məqsədilə tədqiq olunmuşdur. Bundan əlavə, AgSbSe₂ birləşməsinin kinetik xassələri otaq temperaturundan aşağı temperaturalarda praktik olaraq, tədqiq olunmamışdır. Bu birləşmə əsasında alınan bərk məhlullar demək olar ki, tədqiq olunmayıb. Eyni zamanda, AgSbSe₂ birləşməsində və onun bərk məhlullarında quruluş nizamsızlığının təbiəti, elektron quruluşu və onların elektrik yükünün və istiliyin daşınması mexanizmlərinə təsiri və digər məsələlər kifayət qədər tədqiq edilməmişdir.

Tədqiqatın obyektı və predmeti:

Tədqiqatın obyektı AgSbSe₂ və (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) bərk məhlul kristalları, predmeti isə qeyd olunan kristallarda termoelektrik və qalvanomaqnit xassələrin tədqiqidir.

Tədqiqatın məqsəd və vəzifələri:

AgSbSe₂ və (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) tərkibli bərk məhlul kristallarında elektrik yüklərinin və istiliyin daşınması mexanizmlərinin təyin edilməsi və alınmış nəticələrin termoelektrik çeviricilərdə tətbiq imkanlarını müəyyənləşdirməkdən ibarətdir.

Qarşıya qoyulan məqsədə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlər həll edilmişdir:

- AgSbSe₂ kristalının sintezi.
- (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) tərkibli bərk məhlul kristallarının sintezi.
- Tədqiq olunmuş tərkiblərdə diferensial skaner kalorimetriyası və rentgen quruluş analizlərinin aparılması.
- AgSbSe₂ və (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) tərkibli bərk məhlul kristallarında geniş temperatur intervalında (80-600K) kinetik hadisələrin tədqiq edilməsi.
- Tədqiq olunmuş bərk məhlul kristallarının termoelektrik çeviricilərdə tətbiq imkanlarının araşdırılması.

Tədqiqat metodları:

Quruluş və faza analizləri rentgen difraktometriya və diferensial skaner kalorimetriyası metodlarının, termoelektrik və qalvanomaqnit xassələr isə Van-der Pau və dördzondlu potensiometrik metodların köməyiylə tədqiq edilmişdir.

Müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar:

1. AgSbSe_2 birləşməsində $T=363,5\text{K}$, $T=412,8\text{K}$ və $T=498,6\text{K}$ temperaturlarda endotermik effektlərin müşahidə olunması.
2. AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlul kristallarında $80\text{-}235\text{K}$ temperatur intervalında elektrikkeçirmənin sıçrayış mexanizminə malik olması.
3. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında keçiriciliyin tipinin dəyişməsi ($n \rightarrow p$) və işarə inversiya temperaturunun PbTe -un miqdarının artması ilə yuxarı temperaturlara doğru sürüşməsi.
4. AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında qəfəs istilikkeçirməsinin çox kiçik qiymətə malik olması.
5. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ tərkibli bərk məhlul kristalında $110\text{-}66\text{K}$ temperatur intervalında xüsusi müqavimətin ifratkeçirici hala oxşar olaraq, $17550 \text{ Om}\cdot\text{sm}$ -dən sıfıra yaxın qiymətlərə qədər kəskin azalması.
6. Termoelektrik effektivliyi və termoelektrik həssaslığı üçün maksimum qiymətləri alan tərkiblərin müəyyən olunması.

Tədqiqatın elmi yeniliyi:

1. AgSbSe_2 birləşməsinin termoqramında gümüş ionlarının kristal qəfəsin düyünlərini tərk edərək, nizamlı və enerji cəhətdən daha əlverişli hala keçməsi nəticəsində, maksimumları $T=363,5\text{K}$, $T=412,8\text{K}$ və $T=498,6\text{K}$ temperaturlarda olan endotermik effektlər müşahidə olunmuşdur.
2. İlk dəfə olaraq, $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ bərk məhlul kristallarında elektrikkeçirmənin mexanizmi verilmişdir.
3. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) tərkibli bərk məhlul kristallarında keçiriciliyin tipinin dəyişməsi müşahidə edilmişdir.

4. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ tərkibli bərk məhlul kristalında $T \approx 110\text{K}$ -dən aşağı temperaturlarda xüsusi müqavimətin kəskin olaraq azalması müşahidə olunmuşdur.
5. AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında qəfəs istilikkeçirməsinin qiymətinin kiçik olmasına kristal qəfəsin nizamsızlığı, nöqtəvi defektlərdən səpilmə və quruluş komponentləri kimi bir sıra amillərin səbəb olduğu göstərilmişdir.
6. İlk dəfə olaraq, termoelektrik çeviricilərdə tətbiq məqsədilə, $T \approx 300\text{K}$ temperaturda $(\text{AgSbSe}_2)_{0,85}(\text{PbTe})_{0,15}$ bərk məhlul kristalında termoelektrik həssaslığı üçün maksimum $\delta = 12,2 \cdot 10^{-4} \text{ V} \cdot \text{m} / \text{Vt}$ qiyməti alınmışdır.

Tədqiqatın nəzəri və praktiki əhəmiyyəti:

Dissertasiya işində alınmış nəticələr bərk məhlul kristallarında və mürəkkəb yarımkeçiricilərdə kinetik hadisələrin interpretasiyası zamanı;

AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında istilik və elektrik hadisələrinin hərtərəfli analizinin nəticələri müxtəlif termoelektrik çeviricilərin və qurğuların hazırlanmasında;

AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlul kristalları istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin çox kiçik olmasına görə müxtəlif termoelektrik çeviricilərdə p- qanadının həssas elementi kimi, elektronikada mikrosxemlərin qızmasının qarşısını almaq və termoelektrik generatorlarda tətbiq etmək üçün perspektiv material kimi istifadə oluna bilər.

Aprobasiyası və tətbiqi:

Dissertasiyanın nəticələri aşağıdakı konfranslarda məruzə edilmişdir:

- BDU-nun 95 illik yubileyinə həsr olunmuş "Fizikanın müasir problemləri" VIII Respublika konfransı (Bakı, 2014);
- XI Международный семинар "Магнитные фазовые переходы" посвященного 80-летию член-корреспондента Российской академии наук Камилова Ибрагимхана Камиловича (Россия, 2015);

- "Fizikanın aktual problemləri" Respublika elmi konfransı (Bakı, 2015);
- Heydər Əliyevin anadan olmasının 93 illiyinə həsr edilmiş "Gənc tədqiqatçıların IV Beynəlxalq elmi konfransı", (Bakı, 2016);
- "Микро- и нанотехнологии в электронике" VIII Международная научно-техническая конференция, (Россия, 2016).

Dissertasiya işinin mövzusuna aid yerli və xarici mətbuatda 17 elmi əsər nəşr olunmuşdur. Bunların 12-si məqalə 5-i isə konfrans materialıdır.

Dissertasiya işinin yerinə yetirildiyi təşkilatın adı:
Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Dissertasiyanın strukturu və həcmi:

Dissertasiya işi girişdən, dörd fəsildən, nəticələrdən və 133 adda istinad edilmiş ədəbiyyat siyahısından ibarət olmaqla, 155 səhifədə şərh olunmuşdur. Dissertasiya işində 38 şəkil və 4 cədvəl vardır. Şəkillər, cədvəllər və istinad edilmiş ədəbiyyat siyahısı istisna olmaqla, giriş 19350, I fəsil 49979, II fəsil 16810, III fəsil 37493, IV fəsil 43144, nəticələr 1582, ixtisarlər və şərti işarələr isə 868 işarədən ibarətdir. Dissertasiya işinin ümumi həcmi 173046 işarədən ibarətdir.

DISSERTASIYANIN ƏSAS MƏZMUNU

Girişdə dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı əsaslandırılmış, tədqiqatın məqsəd və vəzifələri, tədqiqat metodları, müdafiəyə çıxarılan əsas müddəalar, işin elmi yeniliyi, nəzəri və praktiki əhəmiyyəti göstərilmiş, aprobeasiya dərəcəsi, nəşrlər barədə məlumat verilmiş, həmçinin fəsillər üzrə əsas məzmunu qısaca şərh olunmuşdur.

Dissertasiya işinin **birinci fəslində** $A^I B^V C^{VI}$ qrupuna aid olan $AgSbSe_2$ üçqat birləşməsinin kristal quruluşuna və onun əsasında alınmış bərk məhlulların termoelektrik xassələrinə, onların tətbiq sahələrinə aid ədəbiyyat materialları toplanaraq təhlil edilmişdir. Eyni zamanda, müxtəlif aşqarların $AgSbSe_2$ birləşməsinin

termoelektrik xassələrinə təsirinə aid tədqiqat işlərinə xüsusi diqqət yetirilmişdir.

Aparılmış quruluş tədqiqatlarının nəticələrinin analizləri AgSbSe_2 birləşməsinin birmənalı olaraq, NaCl tip səthə mərkəzləşmiş kubik (SMK) quruluşa malik olduğunu deməyə imkan verir. Qəfəs sabitlərinin qiymətlərindəki fərqliliklər isə sintez rejimlərinin və vurulmuş aşqarların təsiri ilə əlaqədardır.

Ədəbiyyat materiallarının təhlili AgSbSe_2 -nin, əsasən, otaq temperaturundan yuxarı temperaturlarda, termoelektrik xassələrinin öyrənilməsi məqsədilə tədqiq olunduğunu göstərmişdir.

Bundan başqa, AgSbSe_2 birləşməsinin kinetik xassələri otaq temperaturundan aşağı temperaturlarda praktik olaraq, tədqiq olunmamışdır. Bu birləşmənin əsasında alınan bərk məhlulların tədqiqinə də demək olar ki, çox az rast gəlinir. Həmçinin AgSbSe_2 birləşməsində və onun bərk məhlullarında quruluş nizamsızlığının təbiəti, elektron quruluşu və onların elektrik yükünün və istiliyin daşınması mexanizmlərinə təsiri kifayət qədər tədqiq edilməmişdir.

Təqdim olunan dissertasiya işində, yuxarıda qeyd olunan çatışmazlıqları aradan qaldırmaq, daha ətraflı tədqiqatlar aparmaq, eyni zamanda, AgSbSe_2 birləşməsinin kristal quruluşunu sabitləşdirmək və termoelektrik xassələrini daha da yaxşılaşdırmaq məqsədilə, ona müxtəlif tərkiblərdə PbTe əlavə etməklə bərk məhlul kristalları alınmış və geniş temperatur intervalında (80-600K) tədqiq olunmuşdur. Qeyd etmək lazımdır ki, AgSbSe_2 və PbTe birləşmələrinin eyni kristal quruluşa malik olması onların əsasında bir sıra bərk məhlulların alınmasına imkan yaradır.

Dissertasiya işinin **ikinci fəslində** ilkin olaraq, AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarının alınma metodu verilmişdir. Tədqiq edilən bərk məhlul kristalları ilkin komponentlərin (Ag, Sb, Se, Te, Pb) birbaşa əridilməsi metodu ilə alınmış və sintez zamanı təmizliyi 99,99 % olan elementlərdən istifadə olunmuşdur.

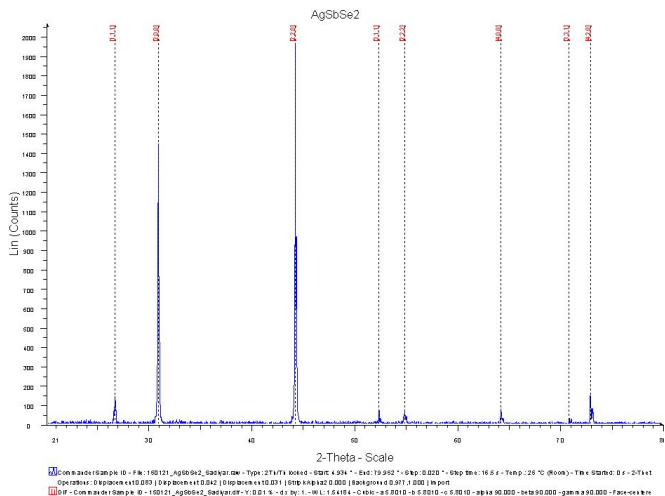
Daha sonra tədqiq olunan nümunələrdə elektrik və istilik kontaktlarının yaradılması və ölçü metodları, termoelektrik xassələri tədqiq etmək üçün istifadə olunan qurğuların sxemləri və onların işləmə prinsipləri şərh olunmuşdur.

Tədqiq olunan AgSbSe₂ və bəzi bərk məhlul kristalları nisbətən böyük müqavimətə malik olduqlarından, onların xüsusi müqaviməti və Holl əmsalı HL5500PC Hall Effect Measurement System ölçü qurğusunda Van-der Pau metodunun köməyiylə tədqiq edilmişdir. Bu zaman ölçü kontaktlarının yaradılması üçün gümüş və qrafit pastalarından istifadə edilmişdir. (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} bərk məhlullarının termoelektrik xassələri isə sabit cərəyanda, dördzondlu potensiometrik metodla tədqiq edilmişdir.

İkinci fəsilə, həmçinin işçi düsturlar, təcrübi xətlərin hesablanma düsturları və ölçü zamanı yol verilən xətlər verilmişdir.

Dissertasiya işinin **üçüncü fəslində** AgSbSe₂ birləşməsinin quruluş, qalvanomaqnit və termoelektrik xassələrinin tədqiqindən alınmış nəticələr şərh olunmuş, elektrikkeçiriciliyinin mexanizmi verilmişdir.

Bu fəsilə AgSbSe₂ kristalının rentgen quruluş analizinin nəticəsində alınmış difraktoqram göstərilmişdir (şəkil 1).



Şəkil 1. AgSbSe₂ kristalının difraktoqramı

Alınmış nəticələr AgSbSe₂ kristalının qəfəs sabiti $a=5,762\text{\AA}$, elementar özəyin həcmi $V=191,355\text{\AA}^3$ və fəza qrupu Fm3m olan NaCl tip quruluşa malik olduğunu göstərmişdir.

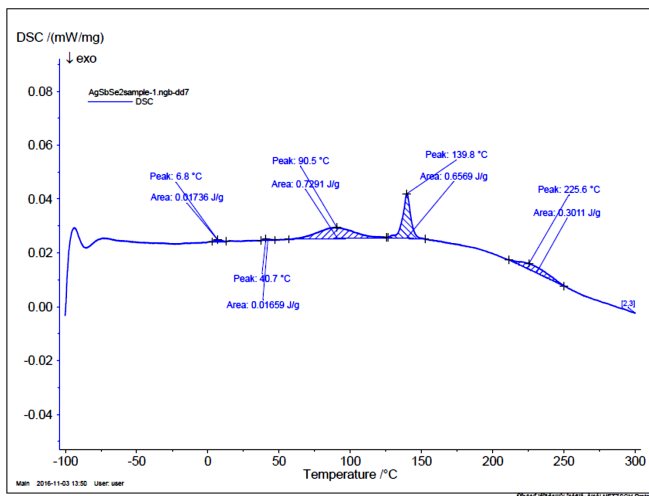
AgSbSe₂ kristalının tədqiq olunan temperatur intervalında faza çevrilmələrinə məruz qalıb-qalmadığını müəyyən etmək məqsədilə, həmçinin onun müxtəlif temperaturalarda (-180-300°C) rentgen quruluş analizi aparılmışdır. Müxtəlif temperaturalarda alınmış difraktoqramlar AgSbSe₂ birləşməsinin monofazalı olduğunu və əlavə fazaların müşahidə olunmadığını təsdiq etmişdir. Kəskin difraksiya piklərinin mövcud olması isə birləşmənin polikristal xüsusiyyətə malik olduğunu göstərmişdir.

AgSbSe₂ birləşməsinin T=900°C (1173K) temperatura kimi diferensial termik analizi (DTA) aparılmış, T=636°C (909K) temperaturda inkonqruent ərimənin başladığı və iki fazaya- Ag₂Se və Sb₂Se₃ fazalarına ayrılmanın baş verdiyi göstərilmişdir. Ayrılma prosesi 420-430°C (693-703K) temperaturda başlamış və 730-740°C (1003-1013K) temperaturda başa çatmışdır. Soyudulma zamanı, kristallaşma T=670°C (T=943K) temperaturda yayılmış ekzoeffektlə müşahidə edilmişdir. Həmçinin T=110°C (T=383K) ətrafında zəif endoeffekt müşahidə olunmuşdur.

AgSbSe₂ birləşməsinin daha ətraflı diferensial skaner kalorimetriyası analizi (DSK) -100-300°C (173-573K) temperatur intervalında aparılmışdır. AgSbSe₂ birləşməsinin DSK analizi nəticəsində 323-393K (T_{max}=63,5K), 398-423K (T_{max}=412,8K) və 483-523K (T_{max}=498,6K) temperatur intervallarında üç endoeffekt müşahidə edilmişdir (şəkil 2)¹.

Məlum olduğu kimi, AgSbSe₂ nizamsız NaCl tip səthə mərkəzləşmiş kubik quruluşa malikdir. Bu quruluşda Se atomları periodik alt qəfəs yaradır, Ag və Sb atomları isə nizamsız şəkildə Na atomlarının yerlərini tuturlar. Qeyri halkogen atomlarının sərbəst paylanması Ag⁺-Ag⁺ və Sb³⁺-Sb³⁺ ionlarının enerji cəhətdən əlverişsiz vəziyyətlərdə yerləşməsinə səbəb olur. Bununla yanaşı, gümüş və stibium ionları enerji cəhətdən əlverişli olan Ag⁺-Sb³⁺ vəziyyətlərində də yerləşə bilirlər. Beləliklə, Ag-Sb alt qəfəsində Ag⁺ və Sb³⁺ ionlarının enerji cəhətdən əlverişli olan və olmayan oblastları

¹Ragimov, S.S. Hopping conduction in AgSbSe₂ and (AgSbSe₂)_{0.9}(PbTe)_{0.1} / S.S. Ragimov, A.A. Saddinova, A.I. Alieva [et al.] // Inorganic materials, – 2020. 56(8), – p. 779-784.



Şəkil 2. AgSbSe₂ kristalının -100-300°C intervalında alınmış DSK əyrisi

mövcud ola bilər. Digər tərəfdən, temperaturun artması nəticəsində Ag ionlarının yerləşdikləri vəziyyətlərindən enerji cəhətdən daha əlverişli olan vəziyyətlərə miqrasiya prosesi də mümkündür. Bu tip proseslər müəyyən enerji tələb etdiyindən nəticədə, DSK əyrisində müşahidə olunan endotermik maksimuma səbəb olur.

Beləliklə, AgSbSe₂ birləşməsinin DSK analizində 323-523K temperatur intervalında müşahidə olunan endoeffektlərin əmələ gəlməsinə səbəb temperatur artdıqca gümüş ionlarının kristal qəfəsin düyünlərini tərk edərək qəfəsin enerji cəhətdən daha əlverişli halını (Ag⁺-Sb³⁺) gücləndirməsi olmuşdur. Onu da qeyd etmək lazımdır ki, AgSbSe₂-nin stexiometrik tərkibi ərimə temperaturuna kimi sabit qalır və parçalanmır.

DSK analizində müşahidə olunan bütün bu endoeffektlər özlərini həm elektrik keçiriciliyinin, həm də termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılıqlarında aydın göstərir.

AgSbSe₂ birləşməsində yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını və eyni zamanda, yürüklüyünü təyin etmək üçün Holl effekti tədqiq olunmuşdur. Holl əmsalının temperatur asılılığında T≈150K ətrafında maksimum müşahidə edilmişdir. Bu maksimuma

temperatur artdıqca elektronların əksəriyyətinin yuxarıda yerləşən alt zonaya keçməsi və keçiricilikdə iştirak edən elektronların effektiv konsentrasiyasının azalması səbəb olmuşdur. Sonra temperatur artdıqca Fermi səviyyəsinin dəyişməsi səbəbindən, elektronların böyük əksəriyyəti keçiricilikdə iştirak edir və Holl əmsalının qiyməti yürüklüyü böyük olan elektronların hesabına yenidən azalır. Aparılmış tədqiqatlar, həmçinin birləşmənin p-tip keçiriciliyə, yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının isə otaq temperaturunda $p=5,6 \cdot 10^{17} \text{sm}^{-3}$ qiymətinə malik olduğunu göstərmişdir.

Bundan başqa, Holl əmsalının və elektrikkeçirmənin temperatur asılılıqları əsasında Holl yürüklüyünün temperatur asılılığı $u(T)$ təyin edilmişdir. Bu asılılığa əsasən, 77-175K temperatur intervalında yürüklüyün temperaturdan asılı olaraq artmasının, verilmiş temperatur intervalında yükdaşıyıcıların yürüklüyünün səpilmə mexanizminin aşqar ionlarından səpilməyə ($r=2$), 175-300K temperatur intervalında yürüklüyün azalmasının isə səpilmə mexanizminin akustik fononlardan səpilməyə ($r=0$) uyğun gəldiyi müəyyən edilmişdir.

Bu fəsilə, həmçinin AgSbSe_2 birləşməsinin termoelektrik hərəkət qüvvəsinin S 80-600K temperatur intervalındakı tədqiqatının nəticələri verilmişdir. Termoelektrik hərəkət qüvvəsinin 80-400K intervalında temperaturdan asılı olaraq, demək olar ki, xətti artdığı, $T \approx 400\text{K}$ temperaturdan sonra isə azaldığı göstərilmişdir. AgSbSe_2 birləşməsinin termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığında $T \approx 400\text{K}$ ətrafında müşahidə olunan bu xüsusiyyətlərə tərkibdə mövcud olan çox az miqdarda Ag_2Se fazasının səbəb olduğu göstərilmişdir. Bunu AgSbSe_2 üçün alınmış DTA-nın nəticəsi də təsdiq edir. Termoelektrik hərəkət qüvvəsi otaq temperaturunda $S=350 \text{mkV/K}$ qiymətinə malik olmuşdur. AgSbSe_2 birləşməsi tədqiq olunan bütün temperatur intervalında p-tip keçiricilik nümayiş etdirmişdir.

Bundan başqa, parabolik zona modeli əsasında, termoelektrik hərəkət qüvvəsinin və yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının qiymətindən istifadə etməklə, AgSbSe_2 birləşməsində yükdaşıyıcıların effektiv kütləsi hesablanmışdır. Hesablamalar nəticəsində, AgSbSe_2 birləşməsinin effektiv kütləsi üçün

$m_p^* = 0,12m_0$ qiyməti alınmışdır.

AgSbSe₂ birləşməsində qadağan olunmuş zonanın eni spektroskopik ellipsometriya təcrübələrinin əsasında optik yolla qiymətləndirilmiş və $E_g = 0,32\text{ eV}$ qiyməti alınmışdır².

AgSbSe₂ birləşməsinin istilikkeçirməsi k 80-350K temperatur intervalında tədqiq edilmiş və temperaturun artması ilə istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin cüzi artdığı müşahidə edilmişdir. Tədqiqatların nəticələri AgSbSe₂ üçün tədqiq olunan temperatur intervalında istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin olduqca kiçik- $k = 0,85\text{ Vt/m}\cdot\text{K}$ qiymətə malik olduğunu göstərmişdir³.

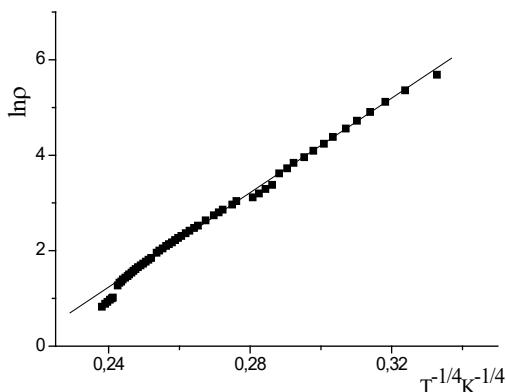
AgSbSe₂ birləşməsinin istilikkeçirmə əmsalının kiçik qiymətə malik olması bir neçə amildən asılı ola bilər: nizamsızlıq, nöqtəvi defektlər və quruluş tərkibləri. AgSbSe₂ birləşməsində Ag və Sb atomlarının nizamlı və nizamsız paylandığı oblastların mövcudluğu, Sb-Se əlaqəsinin yüksək dərəcədə anharmonikliyi, atomların yerdəyişməsi və qəfəsin deformasiyası son nəticədə kristal qəfəsdə fononların səpilmə mərkəzlərinin yaranmasına səbəb olur. Bu isə fononların səpilməsi nəticəsində istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin azalmasına gətirib çıxarır. Gümüş halkogenid birləşmələri, həm də böyük ion keçiriciliyinə malik materiallar olduğundan temperatur artdıqca gümüş ionları kristal qəfəsin düyünlərini tərk edərək, qəfəsin yenidən qurulmasını gücləndirirlər. Bütün bunlar, kristal qəfəsin təhrif olunmasına və nəticədə, istilikkeçirmə əmsalının amorf maddələr üçün səciyyəvi olan, son dərəcə kiçik qiymət almasına gətirib çıxarır. AgSbSe₂ birləşməsində istilikkeçirmə əmsalı yuxarıda qeyd olunan mexanizmlərin birgə baş verməsi hesabına kiçik qiymət alır.

Bu fəsilə AgSbSe₂ birləşməsində 80-600K temperatur intervalında elektrikkeçirmənin temperatur asılılığı verilmişdir. Elektrikkeçirmənin temperatur asılılığını tədqiq etməkdə əsas

²Рагимов, С.С. О ширине запрещенной зоны AgSbSe₂ / С.С. Рагимов, А.И. Алиева, В.Э. Багиев [и др.], Физика и Техника Полупроводников, – 2021, т.55, №4, – с. 291-298.

³Ragimov, S.S., Saddinova, A.A., Aliyeva, A.I. Mechanism of electrical conductivity and thermal conductivity in AgSbSe₂ // Russian Physics Journal, –2019. 62 (6), – p.1077-1081.

məqsəd, AgSbSe_2 birləşməsində və onun bərk məhlullarında keçiriciliyin mexanizminin öyrənilməsi olmuşdur. Aparılmış tədqiqatlar nəticəsində elektrikkeçirmənin qiymətinin digər bu tip termoelektrik materiallarla müqayisədə kifayət qədər kiçik olduğu müəyyən olunmuşdur. Elektrikkeçirmənin temperatur asılılığını şərti olaraq bir neçə intervala ayırmaq olar. Bu temperatur intervallarında $T \approx 200\text{K}$ -dən yuxarı temperaturlarda eksponensial asılılıq ödənilir, lakin $T \approx 200\text{K}$ -dən aşağı temperaturlarda bu asılılıq ödənmir. Buna görə də, $T \approx 200\text{K}$ -dən aşağı temperaturlarda alınmış nəticələr Mott koordinatlarında yoxlanılmış və təcrübi nəticələrin Mott koordinatlarına uyğun gəldiyi məlum olmuşdur. Bunu daha aydın şəkildə görmək üçün AgSbSe_2 birləşməsinin xüsusi müqavimətinin 80-350K intervalında Mott koordinatlarında temperatur asılılığı verilmiş və təcrübi nəticələrin xətti asılılığa uyğun gəldiyi göstərilmişdir (şəkil 3).



Şəkil 3. AgSbSe_2 birləşməsində xüsusi müqavimətin Mott koordinatlarında temperatur asılılığı

Bu nəticələr AgSbSe_2 birləşməsində yükdaşınmanın yükdaşıyıcıların Fermi səviyyəsi yaxınlığında, dar bir enerji zolağında yerləşən lokallaşmış hallardan sıçrayış keçiriciliyi vasitəsilə baş verdiyini göstərir.

AgSbSe₂ üçün Mott asılılığının ödənilməsi aralığını 105K<T<230K temperatur intervalına uyğun gələn müəyyən edilmişdir. Hesablamalar nəticəsində, Fermi səviyyəsi yaxınlığında lokallaşmış halların sıxlığı üçün $g(\mu)=4,3 \cdot 10^{16} \text{eV}^{-1} \text{sm}^{-3}$ qiyməti alınmışdır^{1,3}.

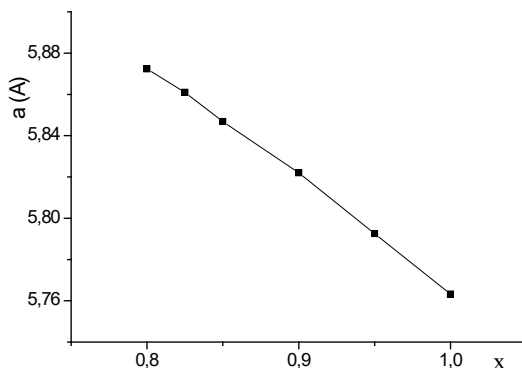
Beləliklə, T≈235K-dən yuxarı temperaturlarda zonada dəşiklərin üstünlük təşkil etməsi səbəbindən zona keçiriciliyinin qiyməti artdığından elektrikkeçirmə temperaturdan asılı olaraq artır. Daha yuxarı temperaturlarda yalnız zona keçiriciliyi üstünlük təşkil edir.

Eyni zamanda, AgSbSe₂ birləşməsinin xüsusi elektrikkeçirməsinin temperaturdan eksponensial asılı olduğunu qəbul edərək, $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ koordinatlarında 200-550K temperatur intervalında xətti oblasta düşən qiymətlərə əsasən, yükdaşıyıcıların aktivləşmə enerjiləri E_a hesablanmışdır. Hesablamalar nəticəsində, AgSbSe₂ birləşməsində yükdaşıyıcıların aktivləşmə enerjisi üçün müxtəlif temperatur intervallarında uyğun olaraq, ΔE=78meV (200-300K), ΔE=211meV (300-400K) və ΔE=130meV (400-500K) qiymətləri alınmışdır. Alınmış nəticələrdən göründüyü kimi, aktivləşmə enerjisi müxtəlif temperatur intervallarında fərqli qiymətlər alır və buna qadağan olunmuş zonada müxtəlif aşqar səviyyələrinin mövcud olması səbəb olur.

Dissertasiya işinin **dördüncü fəslində** AgSbSe₂ birləşməsinə müxtəlif miqdarda PbTe əlavə etməklə alınmış (AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) bərk məhlul kristallarının quruluş və termoelektrik xassələri tədqiq edilmiş və alınmış nəticələr AgSbSe₂ üçün alınan nəticələrlə müqayisəli şəkildə şərh olunmuşdur. 80-350K temperatur intervalında elektrikkeçirmənin mexanizmi verilmiş, eyni zamanda, hər bir tərkib üçün aktivləşmə enerjisi, termoelektrik effektivliyi və termoelektrik həssaslığı hesablanmışdır.

(AgSbSe₂)_x(PbTe)_{1-x} (x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8) sisteminə daxil olan bərk məhlul kristallarının rentgen quruluş analizlərinin nəticələri difraktoqramlar şəklində verilmişdir. Alınmış nəticələr tədqiq olunan kristalların fəza qrupu Fm3m olan NaCl tip quruluşlu, monofazlı olduğunu və qəfəs sabitlərinin tərkibdən asılı olaraq xətti

dəyişdiyini göstərmişdir (şəkil 4). Bu nəticə tədqiq edilən sistemdə verilmiş intervalda bərk məhlul kristallarının yaranmasını göstərir.



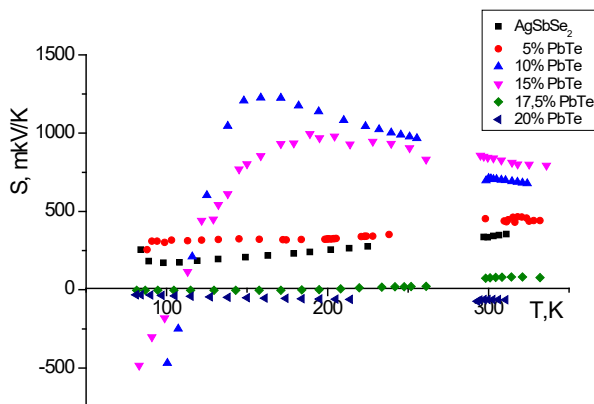
Şəkil 4. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ bərk məhlul kristallarının qəfəs sabitlərinin tərkibdən asılılığı

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarının termoelektrik hərəkət qüvvələri 80-600K temperatur intervalında tədqiq edilmişdir.

Aparılan tədqiqatlar $(\text{AgSbSe}_2)_{0,95}(\text{PbTe})_{0,05}$ bərk məhlulunda termoelektrik hərəkət qüvvəsinin 100-350K, 350-450K və 450-550K temperatur intervallarında maksimumdan keçdiyini göstərmişdir.

AgSbSe_2 üçün aparılmış DSK analizi (şəkil 1) 328- 393K, 398-423K və 483-523K temperatur intervallarında üç endoeffektin müşahidə edildiyini göstərmişdir. Həmçinin AgSbSe_2 birləşməsinə PbTe əlavə edilməsi Pb atomlarının kristal qəfəsə daxil olmasına və nəticədə qəfəsin deformasiyaya uğramasına səbəb olur. Başqa sözlə, AgSbSe_2 birləşməsinin 5% PbTe əlavə etməklə alınmış bərk məhlulu kristal qəfəsin sabitliyini azaldır, lakin ümumi halda kubik quruluş saxlanılmaqla qəfəsin parametrləri artır. Digər tərəfdən, gümüş halkogenidlər ion keçiriciliyinə malik maddələr olduğundan temperatur artdıqca gümüş ionları qəfəsin düyünlərini tərk edir və kristal qəfəsin yenidən qurulmasına təsir edir. Bütün bu qeyd olunan xüsusiyyətlər termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığında özünü göstərir.

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlulları üçün termoelektrik hərəkət qüvvəsinin işarəsinin uyğun olaraq, $T \approx 110\text{K}$, $T \approx 108\text{K}$, $T \approx 190\text{K}$ -dən aşağı temperaturalarda mənfi, temperatur artdıqca verilmiş keçid temperaturlarından sonra işarəsini dəyişərək müsbət olduğu göstərilmişdir¹ (şəkil 5).



Şəkil 5. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ bərk məhlul kristallarının termoelektrik hərəkət qüvvələrinin temperatur asılılıqları

$(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ tərkibli bərk məhlulda isə termoelektrik hərəkət qüvvəsi işarəsini $T \approx 430\text{K}$ -dən sonra dəyişir⁴.

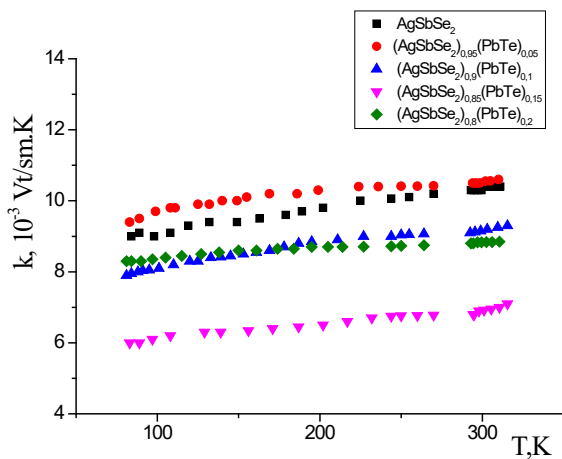
Qeyd etmək lazımdır ki, p-tip keçiriciliyə malik olan AgSbSe_2 birləşməsinə PbTe əlavə edilməsi, tərkibdə PbTe artdıqca ($x \leq 0,9$) donor mərkəzi rolunu oynayan aşqar səviyyələrinin yaranmasına gətirib çıxarır ki, bu da keçiricilikdə yürüklüyü dəşiklərin yürüklüyünə nisbətən böyük olan elektronların iştirak etməsinə səbəb olur. Nəticədə $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlulları üçün yuxarıda qeyd olunmuş keçid temperaturlarından

⁴Rəhimov, S.S., Səddinova, A.A., Bağirov, T.T. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulunun termoelektrik xassələri // Fizika, – 2020. c. XXVI, №2, section: Az, – s. 16-19.

aşağı temperaturalarda termoelektrik hərəkət qüvvəsinin işarəsi mənfi olur. Temperatur artdıqca verilmiş keçid temperaturlarından sonra termoelektrik hərəkət qüvvəsi işarəsini dəyişirək müsbət olur.

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,825; 0,8$) tərkibli bərk məhlulların termoelektrik hərəkət qüvvələrinin $T=300\text{K}$ temperaturdakı qiymətləri (uyğun olaraq, $S=78\text{mkV/K}$ və $S=-63\text{mkV/K}$) AgSbSe_2 birləşməsinin həmin temperaturdakı termoelektrik hərəkət qüvvəsinin qiymətilə ($S=350\text{mkV/K}$) müqayisədə xeyli kiçikdir. Bu azalmaya PbTe ilə aşqarlanmış tərkiblərdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması və yükdaşıyıcıların yüürlüklüyünün azalması səbəb olur.

Bu fəsildə, həmçinin AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarının istilikkeçirmə əmsallarının $80\text{-}350\text{K}$ temperatur intervalındakı tədqiqindən alınmış nəticələrin analizi verilmişdir (şəkil 6).



Şəkil 6. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ bərk məhlul kristallarının istilikkeçirmə əmsallarının temperatur asılılıqları

İstilikkeçirmənin tədqiq olunmasında əsas məqsəd istiliyin daşınma mexanizmini müəyyən etmək olmuşdur. Şəkildən görüldüyü kimi tədqiq olunan bütün tərkiblərdə istilikkeçirmə temperaturdan asılı olaraq zəif artır.

Yuxarıda qeyd olunduğu kimi, AgSbSe_2 nizamsız NaCl tip SMK quruluşda kristallaşır. Belə quruluşda qeyri-halkogen atomlarının sərbəst paylanması Ag^+ və Sb^{3+} ionlarının energetik olaraq əlverişli ($\text{Ag}^+-\text{Sb}^{3+}$) və əlverişsiz (Ag^+-Ag^+ və $\text{Sb}^{3+}-\text{Sb}^{3+}$) vəziyyətlərdə yerləşməsinə səbəb olur. Nəticədə Ag-Sb alt qəfəsində Ag^+ və Sb^{3+} ionlarının enerji cəhətdən əlverişli olan və olmayan oblastları mövcud ola bilər. Digər tərəfdən, temperaturun artması nəticəsində Ag ionları kristal qəfəsin düyünlərini tərk edir və qəfəsin enerji cəhətdən daha əlverişli halını gücləndirir. Bu isə quruluşda olan defektlərin nisbətən azalmasına, nizamlılığın artmasına və nəticə etibarı ilə fononların səpilməsinin azalmasına səbəb olur. Bunun nəticəsində istilikkeçirmə temperaturdan asılı olaraq zəif artır.

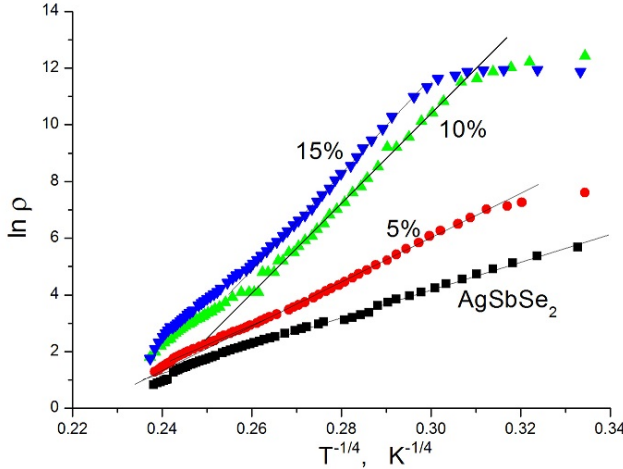
Kristal qəfəsdə mövcud olan oktaedrik koordinasiyanın yüksək dərəcədə anharmonikliyi, kristal qəfəsin nizamsızlığı, nöqtəvi defektlərdən səpilmə AgSbSe_2 birləşməsində və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,8$) bərk məhlul sistemində istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin kiçik olmasına, həmçinin tərkibdə PbTe -un miqdarı artdıqca istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin azalmasına səbəb olur.

Bundan başqa, AgSbSe_2 birləşməsinin istilikkeçirmə əmsalı üçün müxtəlif müəlliflər tərəfindən $T=300\text{K}$ temperaturda alınmış qiymətlərin analizləri verilmiş, AgSbSe_2 birləşməsinin istilikkeçirmə əmsalının qiymətləri arasında bəzi uyğunsuzluqların ortaya çıxdığı qeyd olunmuşdur. Alınmış nəticələrin analizi bu uyğunsuzluqların istilikkeçirmə əmsalının qiymətləndirilməsi metodu və nümunələrin müxtəlif sintez rejimləri ilə əlaqədar olduğunu göstərir. Qeyd etmək lazımdır ki, sintez rejimi kristal quruluşun nizamsızlığına və istilikkeçirmənin qiymətinə güclü təsir edir.

Bu fəsilə $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarında $80-350\text{K}$ temperatur intervalında xüsusi elektrikkeçirmənin temperatur asılılıqları AgSbSe_2 ilə müqayisəli şəkildə analiz edilmişdir. $T=300\text{K}$ -dən aşağı temperaturlarda tərkiblərin elektrikkeçirməsi nisbətən kiçikdir və demək olar ki, çox dəyişmir. Temperatur artdıqca $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ tərkibli bərk məhlul istisna olmaqla, digər tərkiblərdə elektrikkeçirmənin qiyməti artmağa başlayır. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulunun tərkibində

PbTe-un miqdarı çox olduğundan onun elektrikkeçirməsinin temperatur asılılığında metallik gediş müşahidə olunmuşdur.

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlullarının xüsusi müqavimətlərinin temperatur asılılıqları AgSbSe_2 birləşməsi ilə müqayisəli şəkildə Mott koordinatlarında göstərilmişdir (şəkil 7).



Şəkil 7. AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlul kristallarının xüsusi müqavimətlərinin Mott koordinatlarında temperatur asılılıqları

Təcrübi nöqtələrin Mott koordinatlarında xətti asılılığa uyğun gəlməsi, $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlullarında yükdaşınmanın AgSbSe_2 birləşməsində olduğu kimi, yükdaşıyıcıların Fermi səviyyəsi yaxınlığında, dar bir enerji zolağında yerləşən lokallaşmış hallardan sıçrayış keçiriciliyi vasitəsilə baş verdiyini göstərir.

Təcrübələr nəticəsində, $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlulları üçün sıçrayış keçiriciliyinin uyğun olaraq, $113\text{K} < T < 215\text{K}$, $118\text{K} < T < 220\text{K}$ və $127\text{K} < T < 233\text{K}$ temperatur intervallarında baş verdiyi müəyyən edilmişdir.

Hesablamalar nəticəsində, $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlullarında Fermi səviyyəsi yaxınlığında lokallaşmış halların sıxlığı üçün uyğun olaraq, $g(\mu)=6,9 \cdot 10^{15} \text{eV}^{-1} \text{sm}^{-3}$,

$g(\mu)=3,4 \cdot 10^{14} \text{eV}^{-1} \text{sm}^{-3}$ və $g(\mu)=3,7 \cdot 10^{14} \text{eV}^{-1} \text{sm}^{-3}$ qiymətləri alınmışdır.

Beləliklə, aparılmış hesablamalar nəticəsində, AgSbSe_2 -də olduğu kimi, $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) tərkibli bərk məhlullarda da elektrikkeçirmənin 80-235K temperatur intervalında sıçrayış mexanizminə malik olduğu müəyyən edilmişdir. Yuxarı temperaturalarda isə zona keçiriciliyinin qiyməti artır və nəticədə temperatur artdıqca elektrikkeçirmənin qiyməti artır.

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ (0,95; 0,9; 0,85) bərk məhlullarında $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ koordinatlarında 200-550K temperatur intervalında xətti oblasta düşən qiymətlərə əsasən, yükdaşıyıcıların aktivləşmə enerjilərinin qiymətləri hesablanmış və cədvəl şəklində verilmişdir. Hesablamalar nəticəsində, tərkibdə PbTe-un miqdarı artdıqca aktivləşmə enerjisinin qiymətinin AgSbSe_2 birləşməsinin qiyməti ilə müqayisədə artdığı müəyyən edilmişdir.

Bundan başqa, bu fəsildə maraqlı bir nəticə $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ bərk məhlulunun xüsusi müqavimətinin temperatur asılılığında müşahidə olunmuş və xüsusi müqavimətin $T \approx 110\text{K}$ -də maksimumdan keçərək $T \approx 66\text{K}$ -də sıfıra kimi azaldığı göstərilmişdir. Onu da qeyd etmək lazımdır ki, $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ bərk məhlul kristalının otaq temperaturunda rentgen quruluş analizi aparılmış və qəfəs sabiti $a=5,8322\text{\AA}$ olan SMK quruluşa malik olduğu göstərilmişdir. Eyni zamanda, tədqiq olunmuş temperatur intervalında faza quruluşunun sabitliyini öyrənmək məqsədilə, rentgen quruluş analizləri -180°C -dən 400°C temperatúra kimi aparılmışdır. Alınmış nəticələr tədqiq olunmuş bütün temperatur intervalında kristal quruluşun sabit qaldığını və heç bir faza keçidinin baş vermədiyini göstərmişdir¹. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ bərk məhlul kristalını daha ətraflı tədqiq etmək məqsədilə $-100-300^\circ\text{C}$ (173-573K) temperatur intervalında DSK analizi aparılmış və alınmış DSK əyrisində maksimumu $T=406\text{K}$ temperaturda olan bir endoeffekt müşahidə olunmuşdur.

$(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ bərk məhlulunun xüsusi müqavimətinin temperatur asılılığında müşahidə olunan hadisəni daha dəqiq təyin etmək və alınmış nəticəni təsdiqləmək üçün ölçmələr ikinci dəfə 40-280K temperatur intervalında yenidən aparılmışdır. Xüsusi

müqavimətin temperatur asılılığı dörd dəfə - həm soyuma, həm də qızma prosesləri zamanı ölçülmüşdür. Temperatur asılılığındakı maksimumun bütün hallarda təkrarlanması və ilkin $T \approx 120\text{K}$ -dən $T \approx 110\text{K}$ -ə qədər sürüşüb sabitləşməsi müşahidə olunmuşdur. Müqavimətin maksimumdakı ($T \approx 110\text{K}$) və otaq temperaturundakı qiymətləri uyğun olaraq, 234 kOm və 97 Om təşkil etmişdir⁵.

Bu fəsildə, həmçinin AgSbSe_2 birləşməsinin və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ bərk məhlullarının elektrikkeçirməsinin, termoe.h.q-nin və istilikkeçirmə əmsallarının temperatur asılılıqlarının 300-600K temperatur intervalındakı tədqiqindən alınmış nəticələr verilmişdir.

$(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarında, $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulu istisna olmaqla, 300-600K temperatur intervalında elektrikkeçirmənin temperaturdan asılı olaraq artdığı göstərilmişdir.

$(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ tərkibli bərk məhlulda elektrikkeçirmə $T \approx 400\text{K}$ temperatura kimi azalır, $T \approx 400\text{K}$ -dən sonra temperaturdan asılı olaraq artmağa başlayır. Elektrikkeçirmənin qiymətinin temperaturdan asılı olaraq belə kəskin dəyişməsi bu birləşmənin DSK əyrisində 335-435K temperatur intervalında müşahidə edilən və maksimumu $T=376,2\text{K}$ -də olan endoeffektin temperatur oblastına düşür. Baş verən endoeffekt özünü həm elektrikkeçirmənin, həm də termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılıqlarında göstərir⁴.

AgSbSe_2 birləşməsində və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825$) bərk məhlullarında 300-600K intervalında termoelektrik hərəkət qüvvəsi temperatur artdıqca yavaş-yavaş azalır.

$(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulu $T \approx 430\text{K}$ temperatura kimi n-tip keçiriciliyə malik olur. $T \approx 430\text{K}$ temperaturdan sonra termoelektrik hərəkət qüvvəsinin işarəsinin inversiyası baş verir və bərk məhlul p-tip keçiricilik nümayiş etdirir. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulunun termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur

⁵Ragimov, S.S., Saddinova, A.A. Transport properties of $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ // Fizika, – 2016. v. XXII, №4, section: En, – p.13-15.

asılılığında müşahidə olunan tip dəyişməsi, keçiricilikdə həm elektronların, həm də dəşiklərin iştirak etməsini göstərir.

Məlum olduğu kimi, həm AgSbSe_2 , həm də PbTe orta temperaturlarda (400-800K) işləyən yaxşı termoelektrik materiallar hesab olunurlar. Belə termoelektrik materiallara qoyulan əsas tələb onların termoelektrik effektivliyinin yüksək olmasıdır. Bu məqsədlə, dördüncü fəsildə AgSbSe_2 birləşməsinin və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarının hər birinin termoelektrik effektivliyi və termoelektrik həssaslığı üçün müxtəlif temperaturlarda alınmış nəticələrin analizləri verilmişdir.

Termoelektriklik təmiz enerji istehsalından başlamış fotonları aşkar edən qurğulara qədər geniş tətbiq sahəsinə malik olması səbəbindən böyük elmi və texniki maraq kəsb edir. Termoelektrik texnologiyası elektrik enerjisi istehsalında, isitmə və soyutma sistemlərində istifadə oluna bilər. Termoelektriklik, eyni zamanda, istiliyi birbaşa elektrik enerjisinə çevirmə qabiliyyətinə görə perspektiv enerji çevirmə texnologiyası olaraq qəbul edilir. Öz yüksək etibarlılığı və sadəliyinə görə termoelektrik generatorlar son illərdə kosmik enerji kimi sahələrdə geniş istifadə edirlər.

Termoelektrik çeviricilərin termoelektrik xüsusiyyətlərini təyin edən əsas kəmiyyət onların hazırlandığı yarımkəçirici materialların termoelektrik effektivliyidir.

Məlum olduğu kimi, materialların termoelektrik effektivliyini Z ($Z = \frac{\sigma S^2}{k}$) artırmaq üçün böyük termoelektrik hərəkət qüvvəsinə (S), elektrikkeçirməyə (σ) və kiçik istilikkeçirməyə (k), ya da hər iki faktora malik materiallar almaq lazımdır.

Bu məqsədlə, dissertasiya işində AgSbSe_2 birləşməsinin və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825$) bərk məhlullarının elektrikkeçirmələrinin, termoelektrik hərəkət qüvvələrinin və istilikkeçirmə əmsallarının 300-600K temperatur intervalında alınmış qiymətlərinə əsasən, onların termoelektrik effektivlikləri hesablanmışdır.

Tədqiqat işlərinin nəticələri AgSbSe_2 birləşməsində və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825$) bərk məhlullarında termoelektrik effektivliyinin qiymətinin temperaturdan asılı olaraq artdığını və daha böyük qiymətlərin $T \approx 450\text{K}$ -dən yuxarı

temperaturlara uyğun gəldiyini göstərmişdir. Alınan bu nəticə gözlənilən idi, çünki bu tərkiblərin hər ikisi orta temperatur intervalında istifadə olunan termoelektrik materiallardır. Termoelektrik effektivliyi üçün maksimum $Z=0,16 \cdot 10^{-3} \text{K}^{-1}$ qiyməti $T=520\text{K}$ temperaturda $(\text{AgSbSe}_2)_{0,825}(\text{PbTe})_{0,175}$ bərk məhlulunda alınmışdır⁶.

Əvvəldə qeyd olunduğu kimi, termoelektrik effektivliyi adətən termoelektrik generatorlarda və soyuducularda istifadə olunan materiallarda daha mühüm rol oynayır. Lakin termoelektrik çeviricilərdə istifadə olunan materiallarda onların termoelektrik hərəkət qüvvəsinin istilikkeçirmə əmsalına nisbətindən təyin olunan kəmiyyət - termoelektrik həssaslığı δ ($\delta = \frac{S}{k}$) əsas rol oynayır.

Bu məqsədlə, AgSbSe_2 birləşməsinin və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarının termoelektrik hərəkət qüvvələrinin və istilikkeçirmə əmsallarının 300-600K temperatur intervalında alınmış qiymətlərinə əsasən, onların termoelektrik həssaslıqları hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri AgSbSe_2 -nin və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlullarının termoelektrik həssaslığının qiymətinin PbTe-un miqdarından asılı olaraq əvvəlcə artdığını, sonra isə $x=0,85$ qiymətində maksimumdan keçərək azaldığını göstərmişdir. Termoelektrik həssaslığı üçün maksimum $\delta=12,2 \cdot 10^{-4} \text{V} \cdot \text{m}/\text{Vt}$ qiyməti otaq temperaturu ətrafında alınmışdır. Bu isə termoelektrik çeviricilərdə istifadə olunan həssas elementlər üçün qoyulan əsas tələblərdən biridir.

Beləliklə, qeyd etmək olar ki, AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristalları arasında termoelektrik effektivliyinin maksimum qiymət aldığı $(\text{AgSbSe}_2)_{0,825}(\text{PbTe})_{0,175}$ və termoelektrik həssaslığının maksimum qiymət aldığı $(\text{AgSbSe}_2)_{0,85}(\text{PbTe})_{0,15}$ tərkibli bərk məhlullar praktiki tətbiq baxımından daha yararlıdır.

⁶Səddinova, A.A. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,825}(\text{PbTe})_{0,175}$ bərk məhlulunun termoelektrik effektivliyi // Energetikanın problemləri, – 2019. №3, – s. 76-80.

NƏTİCƏ

1. İlk dəfə olaraq, AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85$) bərk məhlul kristallarında 80-235K temperatur intervalında elektrikkeçirmənin sıçrayış mexanizmə malik olduğu göstərilmişdir.
2. İlk dəfə olaraq, $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ bərk məhlul kristalında 110-66K intervalında temperatur azaldıqca xüsusi müqavimətin ifratkeçirici hala oxşar olaraq, $\rho=17550 \text{ Om}\cdot\text{sm}$ -dən sıfıra yaxın qiymətlərə qədər kəskin azalması müşahidə edilmişdir.
3. $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında yürüklüyü dəşiklərin yürüklüyünə nisbətən böyük olan elektronların iştirak etməsi nəticəsində keçiriciliyin tipinin dəyişməsi ($n \rightarrow p$) və inversiya temperaturunun PbTe-un miqdarının artması ilə yuxarı temperaturalara doğru sürüşməsi müşahidə edilmişdir.
4. AgSbSe_2 birləşməsinin termoqramında maksimumları $T=363,5\text{K}$, $T=412,8\text{K}$ və $T=498,6\text{K}$ temperaturalarda olan endotermik effektlər müşahidə olunmuş və göstərilmişdir ki, bu gümüş ionlarının kristal qəfəsin düyünlərini tərk edərək nizamlı və enerji cəhətdən daha əlverişli olan $\text{Ag}^+ - \text{Sb}^{3+}$ hala keçməsi nəticəsində baş verir.
5. Göstərilmişdir ki, kristal qəfəsdə olan oktaedrik koordinasiyanın yüksək dərəcədə anharmonikliyi, kristal qəfəsin nizamsızlığı, nöqtəvi defektlərdən səpilmə və quruluş komponentləri kimi bir sıra amillər AgSbSe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_x(\text{PbTe})_{1-x}$ ($x=0,95; 0,9; 0,85; 0,825; 0,8$) bərk məhlul kristallarında istilikkeçirmə əmsalının qiymətinin çox kiçik olmasına, həmçinin tərkibdə PbTe-un miqdarı artdıqca istilikkeçirmənin azalmasına səbəb olur.
6. Müəyyən edilmişdir ki, termoelektrik effektivliyi $Z=0,16 \cdot 10^{-3} \text{K}^{-1}$ maksimum qiymətini $T=520\text{K}$ -də $(\text{AgSbSe}_2)_{0,825}(\text{PbTe})_{0,175}$, termoelektrik həssaslığı isə maksimum $\delta=12,2 \cdot 10^{-4} \text{V}\cdot\text{m/Vt}$ qiymətini $T \approx 300\text{K}$ -də $(\text{AgSbSe}_2)_{0,85}(\text{PbTe})_{0,15}$ tərkibli nümunələrdə alır.

Dissertasiyanın mövzusu üzrə dərc olunmuş işlərin siyahısı

1. Рагимов, С.С., Саддинова, А.А. Электрические свойства AgSbSe_2 // BDU-nun 95 illik yubileyinə həsr olunmuş "Fizikanın müasir problemləri" VIII Respublika konfransı, – Bakı, – 24-25 dekabr, – 2014, – с. 142-143.
2. Рагимов, С.С. Эффект Холла в AgSbSe_2 / С.С. Рагимов, А.А. Саддинова, Р.И. Селим-заде [и др.] // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, – 2015. с. XXXV, №2, – с. 111-113.
3. Рагимов, С.С., Саддинова, А.А., Бабаева, А.Э. Особенности электрофизических свойств AgSbSe_2 и AgSbTe_2 // Материалы XI Международного семинара "Магнитные фазовые переходы", посвященного 80-летию член-корреспондента Российской академии наук Камилова Ибрагимхана Камиловича. – Махачкала, – Россия, – 19-21 ноября, – 2015, – с. 243-245.
4. Rəhimov, S.S., Babayeva, A.E., Saddinova, A.A., Əliyev, İ.M., Rəhimov, R.Ş. AgSbTe_2 və $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ -nin quruluş və elektrofiziki xassələri // "Fizikanın aktual problemləri" Respublika elmi konfransı, – Bakı, – 17 dekabr, – 2015, – s. 125-128.
5. Səddinova, A.A., Əliyeva, A.İ. PbTe əlavəsinin AgSbSe_2 birləşməsinin xüsusi müqavimətinə təsiri // Heydər Əliyevin anadan olmasının 93 illiyinə həsr edilmiş "Gənc tədqiqatçıların IV Beynəlxalq elmi konfransı", – Bakı, – Qafqaz Universiteti, – 29-30 aprel, – 2016, – s. 80-81.
6. Рагимов, С.С., Бабаева, А.Э., Саддинова, А.А., Алиева, А.И. Особенности эффекта Холла в AgSbTe_2 и AgSbSe_2 // VIII Международная научно-техническая конференция "Микро- и нанотехнологии в электронике", – Нальчик, – Россия, – 30 мая-4 июня, – 2016, – с. 20-24.
7. Рагимов, С.С., Саддинова, А.А., Селим-заде, Р.И. Энергия активации носителей заряда в AgSbSe_2 // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, – 2016. с. XXXVI, №5, – с. 105-107.

8. Ragimov, S.S., Saddinova, A.A. Transport properties of $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ // Fizika, – 2016. v. XXII, №4, section: En, – p.13-15.
9. Ragimov, S.S. Thermoelectric properties of AgSbSe_2 and AgSbSeTe / S.S. Ragimov, A.İ. Aliyeva, A.A. Saddinova [et al.] // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, Fizika və Astronomiya, – 2017. c. XXXVII, №5, – p. 105-109.
10. Rəhimov, S.S., Səddinova, A.A. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,95}(\text{PbTe})_{0,05}$ -in termoelektrik xassələri // Fizika, – 2018. v. XXIV, №3, section: Az, – s. 146-147.
11. Ragimov, S. S., Saddinova, A. A., Aliyeva, A. I. Mechanism of electrical conductivity and thermal conductivity in AgSbSe_2 // Russian Physics Journal, – 2019. 62 (6), – p.1077-1081.
12. Рагимов, С. С. Структура и рамановский спектр AgSbSe_2 и $\text{AgSbSe}_{1,5}\text{Te}_{0,5}$ / С.С. Рагимов, А.А. Саддинова, А.И. Алиева [и др.] // Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Xəbərləri, Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, – 2019. c. XXXIX, №2, – s. 155-159.
13. Səddinova, A.A. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,95}(\text{PbTe})_{0,05}$ bərk məhlulunda yükdaşıyıcıların aktivləşmə enerjisi // Fizika, – 2019. c. XXIV, №3, section: Az, – s.13-15.
14. Səddinova, A.A. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,825}(\text{PbTe})_{0,175}$ bərk məhlulunun termoelektrik effektivliyi // Energetikanın problemləri, 2019. №3, – s. 76-80.
15. Ragimov, S.S. Hopping conduction in AgSbSe_2 and $(\text{AgSbSe}_2)_{0,9}(\text{PbTe})_{0,1}$ / S.S. Ragimov, A.A. Saddinova, A.I. Alieva [et al.] // Inorganic materials, – 2020. 56(8), – p. 779-784.
16. Rəhimov, S.S., Səddinova, A.A., Bağirov, T.T. $(\text{AgSbSe}_2)_{0,8}(\text{PbTe})_{0,2}$ bərk məhlulunun termoelektrik xassələri // Fizika, – 2020. c. XXVI, №2, section: Az, – s. 16-19.
17. Рагимов, С.С. О ширине запрещенной зоны AgSbSe_2 / С.С. Рагимов, А.И. Алиева, В.Э. Багиев [и др.], Физика и Техника Полупроводников, – 2021, т.55, №4, – с. 291-298.

Dissertasiyanın müdafiəsi 24 sentyabr 2021-ci il tarixində saat 1400 da Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən ED 1.14 Dissertasiya şurasının iclasında keçiriləcək.

Ünvan: Az-1143, Bakı şəh., H. Cavid pr. 131

Dissertasiya ilə Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq mümkündür.

Dissertasiya və avtoreferatın elektron versiyaları Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutunun rəsmi internet saytında yerləşdirilmişdir.

Avtoreferat 23 iyul 2021-ci il tarixində zəruri ünvanlara göndərilmişdir.

Çapa imzalanıb: 16.07.2021
Kağızın formatı: A5
Həcm: 38111
Tiraj: 100