

Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} KRİSTALLARINDA Ni_{1.297}Te FONON LOKALİZASİYALARI**S.R. ƏZİMOVA, N.M. ABDULLAYEV***Azərbaycan Elm və Təhsil Nazirliyinin H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutu**Bakı, Azərbaycan, AZ-1143, H.Cavid pr., 131*

E_mail: sevinc_azimova_82@mail.ru

Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} termoelektrik materialın təbəqələrinə elektrolitik üsulu ilə, Ni²⁺ kationları daxil etməklə bir sıra nümunələr alınmışdır. İstilikkeçirmə əmsalın azalma dinamikası aşkar edilmişdir. Van-der-Waals təbəqəsinin vakansiyalarında Ni_{1.297}Te klasterlər sərhədində əmələ gətirdiyi optik fononlar istilik keçiriciliyinin azalmasına səbəb olur. Kristalda Ni_{1.297}Te kvant nöqtələrin əmələ gətirdiyi kiçik ölçülü effektin təsirindən istilik keçiriciliyinin ~42-dən 35 Vt/(m×K)-ə qədər lay müstəvisi boyu azalması müşahidə olunur. Yeni əmələ gəlmiş fonon lokalizasiyasının istilikkeçiriciliyin azalmasına təsiri ətraflı tədqiq olunmuşdur.

Açar sözlər: istilikkeçirmə, kvant nöqtələr, klaster, vakansiya, fonon lokalizasiyası.**PACS:** 62.20Fe, 61.72.Cc, 61.72.Lk**1. Giriş**

Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} termoelektrik yarımkəçiricinin nikel ionları ilə interkalasiyası prosesi zamanı Van-der-Waals zolağında aşqarların paylanması, yükün ötürülməsi mexanizminin öyrənilməsi aktualdır. Bərk cisimlərdə istilik keçiriciliyi qəfəs düyünlərdə yerləşən atomların və ya molekulaların rəqsi səbəbindən – fononlarla baş verir. Bu göstəricilərin öyrənilməsi maraqlıdır.

İstilikkeçiriciliyi azaltmaq üçün ərinti tərkibinə aşqar elementlər daxil edilir, bu da kristal qəfəsi pozur və quruluşu incə dənəli edir. Dənəciklərin ölçüsü nə qədər kiçik olsa, istilik ötürülməsi bir o qədər az olar. Məlumdur ki, müxtəlif fazalar quruluşunda ərintinin əsası ilə müqayisədə onun istilik enerjisini keçirmə qabiliyyətini azaldır [1].

Bunları nəzərə alaraq, fononları lokallaşdırmaq üçün matrisin quruluşuna xırda dənəciklərin daxil edilməsi məqsəduyğundur.

2. Nümunənin hazırlanması və quruluşu

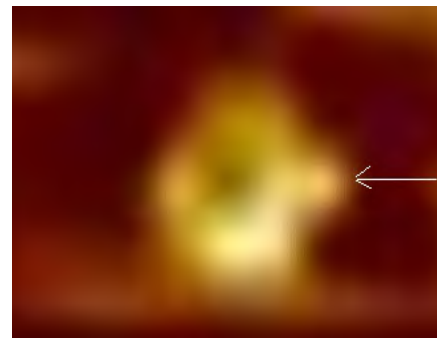
Elektroliz üsulunda 0,5% NiSO₄ elektrolit məhlulundan istifadə olunmuşdur. Mənfi elektrod qismində Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} laylı kristalı istifadə olunmuşdur. Nümunələr elektrolitdən Ni⁺² ionlarını 2, 4, 8, 12, 20, 30 dəqiqə ərzində nüfuz etdirməklə hazırlanmışdır. Van-der-Waals təbəqələrində klaster əmələ gəlməsinin xüsusiyyətlərini öyrənmək üçün 1×2 sm ölçüdə laylı Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} kristallarının nümunələrindən istifadə etdik. Mənfi elektrod olaraq Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} kristalından, müsbət elektrod isə karbon istifadə edilmişdir. Nümunənin interkalasiyası zamanı sulu məhluldakı cərəyan 5V, gərginlik ~0,7A idi. 1÷30 dəqiqəlik fasilələrlə interkalasiya zamanı məhlulun temperaturu 65°C saxlanılır.

Rentgen şüalarının difraksiya təhlili Bruker D2 fazalı difraktometrdən və $8^{\circ} < 2\theta < 65^{\circ}$ diapazonunda Cu^{K α} şüalarından ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) istifadə edilməklə aparılmışdır. EVA və TOPAZ proqramlarından istifadə etməklə kristalloqrafik və struktur tədqiqatlar və hesablamalar aparılmışdır. ASTM məlumatlarının, o cümlədən, 2018-ci ilin cihazın elektron yaddaşında olması, əldə edilən difraksiya məlumatlarını ədəbiyyat məlumatları ilə hərtərəfli müqayisə etməyə imkan verir.

Nikel tərkibi 1,33% olan laylararası parametrlər $Pmc2_1$, $a=3,909 \text{ \AA}$, $b=6,863 \text{ \AA}$, $c=12,340 \text{ \AA}$, $\alpha=90^{\circ}$, $\beta=90^{\circ}$, $\gamma=90^{\circ}$ və həcmi $a*b*c=331,0509 \text{ \AA}^3$ -a uyğun gəlir. Rentgen analizlərində Ni ionları təbəqələrin səthindəki defekt (deşiklərdəki) boş yerləri əvəz edir və 1,17%- Ni_{1.297}Te klasterləri əmələ gətirir [2].

Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} nazik təbəqənin zamanı ortorombik quruluşlu Ni_{1.297}Te birləşməsinin özəyini əmələ gəlir. [3]. İlkin formada Ni_{1.297}Te birləşməsi 6 nm ölçüdə kvant nöqtələr əmələ gətirir. Bunlar isə birləşərək 35±5nm ölçüdə klasterləri əmələ gətirir.

Ni_{1.297}Te klasterləri uyğun minimal ölçülərə malikdir və atomların sayı $n=10^6$ ilə 35±5nm-ə qədərdir. Onlar səth müstəvisində özünü təşkil nəticəsində bir xətt boyunca ikiqat, üçqat, dördqat, özləklər 70, 100, 130nm ölçüləri olan nano-cubuqlar əmələ gətirir [4]. Müxtəlif kristal qəfəsli maddələtin alınmasında epitaksiya metodu məşhurdur. Elektroliz metodu ilə Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3} və Ni_{1.297}Te yarımkəçiricilərinin fərqli tərkib kristallarının alınması müşahidə olunur. Fonon nöqtələrinin forması halqa formalıdır (şəkil 1).



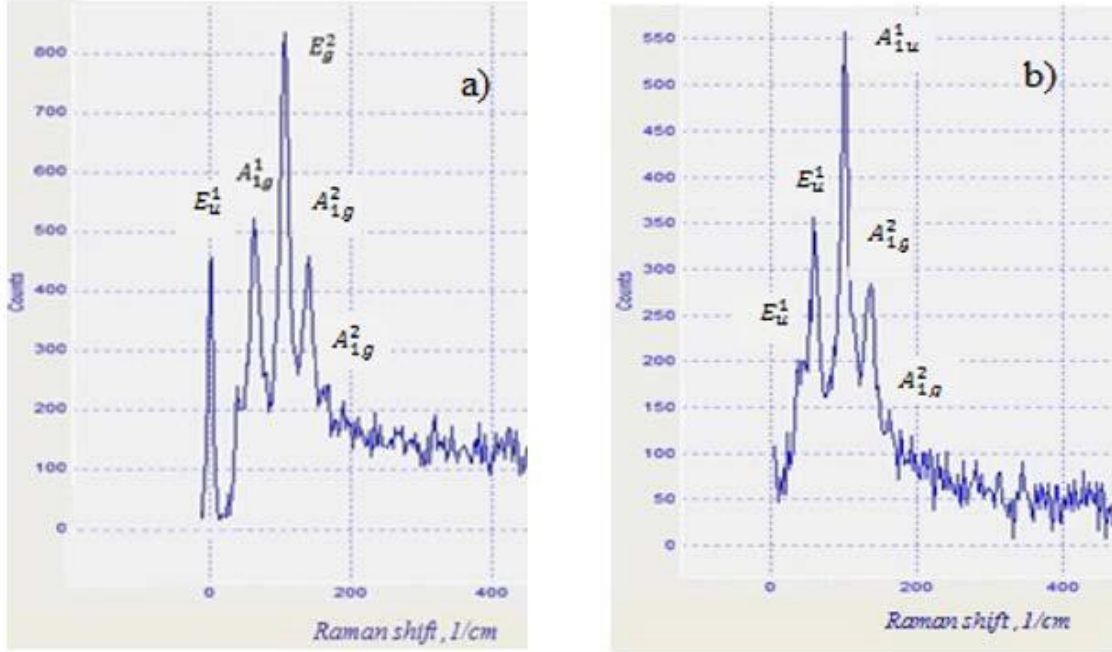
Şəkil 1. Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3}<Ni> tərkibində Ni_{1.297}Te halqa klasterləri.

Cədvəl
Bi₂Te_{2.7}Se_{0.3}<Ni> nümunəsinin SEM analizi [5]

Element	Çəki%	Atom%
Ni K	1.76	4.61
Se L	3.14	6.11
Te L	41.56	49.98
Bi M	53.53	39.31
100%		

293 K otaq temperaturunda 1 nümunəsi üçün nikel aşqarlarının miqdarı 1.76 % SEM mikroskopunun və Ni aşqarının miqdarı tərkibdə 1.77% olduqda, rentgenin nəticələri dəqiqliyi təsdiqləyir. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ nümunəsinin SEM analizindən alınmış nəticələr cədvəldə verilmişdir [5].

Digər tərəfdən, spektroskopik Raman ölçülərindən, A_1^1g , $E g^2$ optik modların sönməsi və yeni E^1u , A_1^1u fonon rejimlərinin yaranması nikellə aşqarlanmış $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ kristallarında işığın fonon udulmasının artmasının rolunu göstərir (şəkil 2) [6].



Şəkil 2. Aşqarsız $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ (a) və nikel qatılı $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ (b) Raman spektrləri. (Nümunəyə düşən lazer-532 nm və 0,6 mVt şüalanma gücündə) [6].

Dənəciklərin ölçülərini, quruluşda fazaların əvəz etmələrini, homogenliyini, özünütəşkili, fonon udulmalarını və istilikkeçirmə, temperatur keçirmə ilə düz mütənasib olduğunu nəzərə alaraq, bu nəticəyə gəlmək olar ki, Ni ionları ilə aşqarlanma etməklə Bi_2Te_3 laylı kristalın istilikkeçirməsini azaltmaq mümkündür.

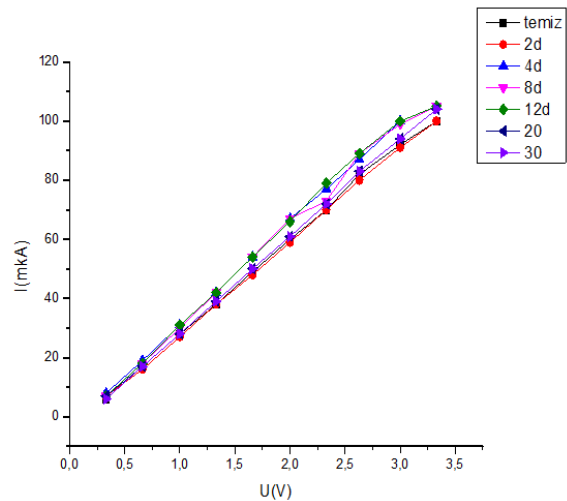
3. Eksperimental nəticələri və onların müzakirəsi

Elektroliz prosesində elektrodlardan biri olan $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylı kristalına Ni^{2+} ionlarının 2, 4, 8, 12, 20, 30 dəqiqə zaman intervalında nüfuz etməsindən asılı bir neçə nümunələr olunmuşdur. Nümunələrin Volt-Ampere xarakteristikası (VAX) standart üsula uyğun olaraq stasionar rejimdə ölçülmüşdür. Elektrik ölçmələri üçün tədqiq olunan nümunələr kristalın təbəqələri c oxu boyunca xarici sabit elektrik sahəsinin tətbiq edilməsi üçün hazırlanmışdır.

Tədqiq olunan $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ nümunələrin kontaktların yapılmasında təmas sahəsi 10^{-2} sm^2 gümüş pastadan istifadə edilmişdir. Kontaktların omikliyi cərəyan-gərginlik xarakteristikasından, nümunə boyu iki istiqamətdə potensialın ölçülməsi ilə müəyyən edilmişdir. Tədqiqatlar B 7-12 elektrometri əsasında yığılmış qurğuda aparılmışdır. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}\langle\text{Ni}\rangle$ nikellə aşqarlanmış və aşqarlanmamış nümunələrinin statik VAX qrafiki şəkil 3-də verilmişdir.

Şəkildən görüldüyü kimi, VAX-sında 8d əyrisinin orta hissəsində enmə baş verir, bu da istilikkeçirmə əyrisində keçiriciliyin $50 \text{ Vt/m}\times\text{K}$ qiymətində özünü

göstərir. VAX-sında 12d əyrisi isə son qiymətində enmə istiqamətində düz xəttliyəndən çıxır. Bu da istilikkeçirmə əyrisində (şəkil 3) Ni-in miqdarının artması ilə istilikkeçirmənin artmasına uyğundur və $t=100^\circ\text{C}$ temperaturunda Ni-in istilikkeçirməsinin qiymətini $92 \text{ Vt/m}\times\text{K}$ olduğunu təsdiqləyir.

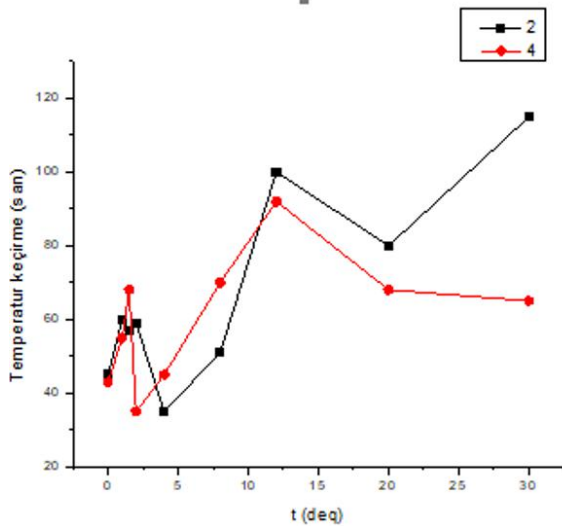


Şəkil 3. Donor aşqarlı Ni^{2+} ionları ilə (0, 2, 4, 8, 12, 20, 30 dəq) aşqarlanmış $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ nümunələri üçün statik VAX-ları.

VAX xarakteristikasından görünür ki, 2, 4, 8, 12 dəqiqə müddətində cərəyanın artması, 20-30 dəqiqə

müddətdə isə cərəyanın azalması ilə geri dönüş edərək təmiz hala uyğun xarakteristika müşahidə olunur. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ bərk məhlulunun elektrik keçiriciliyinə təsir edir.

Nümunənin kontaktları, Otaq- 80°C , temperatur fərqi aparılan ölçülərin temperatur keçiriciliyi *Hti HT- 820 Body interaed termometr (Accuracy $\pm 0,3^\circ\text{C}$)* pirometri vasitəsilə ölçülmüşdür. Ölçmənin nəticələri şəkil 4- də göstərilmişdir.



Şəkil 4. Ni^{2+} ionları ilə (1, 1.5, 4, 8, 12, 30 dəq.) aşqarlanmış $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ nümunələri üçün temperatur keçirmənin zamandan asılılıq qrafiki.

Şəkil 4-dən görüldüyü kimi, qrafikin növbəti nöqtələrinin addımı interkalyasiya müddətindən, Ni ionlarının müxtəlif konsentrasiyasından asılı olaraq 1-1,5-4-8-12-30 dəqiqədə keçiriciliyin artması, 2, 20 və 30 dəqiqədə azalması ilə müşahidə olunur. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ nümunələri Ni-lə interkalyasiyanın konsentrasiyasından asılı olaraq 2-4 dəq. intervalında istilikkeçirmənin qiymətini $42\text{Wt/m}\times\text{K}$ -dən $35\text{Wt/m}\times\text{K}$ -ə qədər endirmək mümkün olmuşdur. Qrafikdə iki oblastda (4 dəq. və 20 dəq.) piklərin minimumu müşahidə olunur. 40-70 intervalında yüksəliş Ni^+ ionlarının təsiri ilə tərkibdə kvant nöqtələrin əmələgəlməsi, 70-30 intervalında enmə $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ klasterləri ilə 70-100 intervalında yüksəliş $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ naqilləri ilə əlaqədardır. Tədqiq olunan kvant nöqtənin ölçüləri 6 nm-dir və bir istiqamətdə laylararası iki koordinatlı lövhə ilə enerjini şüalandırır. Bu da istilik keçirməni dəyişir. (Semiconductor cuvantum dot-SCD [7-8])

Nəticə:

$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ kristalında 35nm $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ nanoklasterlərin istilik keçirmə əmsalının ~ 42 -dən $35\text{Wt/(m}\times\text{K)}$ -ə qədər lay müstəvisi boyu azalması müşahidə olunur. Van-der-Waals təbəqəsinin vakansiyalarında $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ klaster sərhədinin əmələ gətirdiyi yeni optik fononlar istilik keçiriciliyinin azalmasına səbəb olur.

İstilikkeçirmə əmsalının azalma dinamikasında, 6nm-lik klasterində $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ kvantnöqtələrin kiçik ölçülü effektivlə yeni əmələ gətirdiyi fonon lokalizasiyası istilikkeçiriciliyinin azalmasına səbəb olur.

- [1] <https://vt-metall.ru/articles/919-teploprovodnost-metallov/>.
- [2] A.M. Həşimov, S.R. Əzimova, K.Ş. Qəhrəmanov, Y.Q. Əsədov, S.Ş. Qəhrəmanov, M.A. Həsənov, N.M. Abdullayev. Yeni nanokristallik skrukturlar əsasında termoelektrik nazik təbəqələrin işlənməsi, “Elektrotexnikanın texniki və fiziki problemləri” mövzusunda 15-ci Beynəlxalq Konfrans ICTPE-2019, İstanbul Rumeli Universiteti Türkiyə, səh.108-112.
- [3] L.D. Gulay, I.D. Olekseyuk. Crystal structures of the compounds Ni_3Te_2 , $\text{Ni}_{3-\delta}\text{Te}_2$ ($\delta=0.12$) and $\text{Ni}_{1.29}\text{Te}$ Journal of Alloys and Compounds Volume 376, Issues 1–2, 2004, p. 131-138.
- [4] S.R. Azimova, Sh.S. Ismayilov, I. Gasimoglu, N.M. Abdullayev. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ crystal conductivity peculiarities, AJP Fizika 2022, volume XXVIII № 1, section En, p.58-60.
- [5] S.R. Əzimova, A.M. Abdullayev. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ laylarında kristallik özəklərin və nanoməftillərin formalaşma xüsusiyyətləri, AJP Fizika, 2021, Sec. Az. vol XXVII, № 4, səh. 46-50.
- [6] S.R. Əzimova, N.M. Abdullayev. $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}<\text{Ni}>$ laylı kristallarında fonon dinamikası, “Fizikanın və astronomiyanın müasir problemləri” mövzusunda respublika elmi konfransı, Naxçıvan 2021, səh.115.
- [7] N.B. Singh, Richa Tomar. Yarımkəçirici kvant nöqtələri, 2020, 26 səh. DOI: <https://doi.org/10.21741/9781644901250-12>.
- [8] N.B. Singh, Richa Tomar. Semiconductor Quantum Dots, Materials Research Foundations, 2021, Vol. 96, p. 305-330.

S.R. Azimova, N.M. Abdullaev

$\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ PHONON LOCALIZATIONS IN $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ CRYSTALS

A number of samples were obtained by the electrolytic method by introducing Ni^{2+} cations into layers of the thermoelectric material $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$. The dynamics of the decrease in the heat transfer coefficient have been revealed. A new mode of optical phonon, formed at the boundary of $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ clusters in vacancies of the Van-der-Waals layer, causes a decrease in thermal conductivity. Due to the influence of small-sized effects formed by $\text{Ni}_{1.297}\text{Te}$ nanodots in the crystal, the heat transfer coefficient - thermal conductivity decreases from ~ 42 to $35\text{W/(m}\times\text{K)}$ along the plane of the layer. It has been shown that different degrees of phonon localization lead to a decrease in thermal conductivity.

С.Р. Азимова, Н.М. Абдуллаев

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ФОНОНОВ Ni_{1,297}Te В КРИСТАЛЛАХ Bi₂Te_{2,7}Se_{0,3}

Электролитическим методом были получены ряд образцов введением катионов Ni²⁺ в слой термоэлектрического материала Bi₂Te_{2,7}Se_{0,3}. Выявлена динамика снижения коэффициента теплопередачи. Новая мода оптического фонона, образующаяся на границе кластеров Ni_{1,297}Te в вакансиях слоя Ван-дер-Ваальса, вызывает уменьшение теплопроводности. За счет влияния мелкоразмерных эффектов, образуемых наноточками Ni_{1,297}Te в кристалле, коэффициент теплоотдачи - теплопроводность снижается с ~42 до 35 Вт/(м×К) вдоль плоскости слоя. Показано, что различные степени локализации фононов приводят к уменьшению теплопроводности.

Qəbul olunma tarixi: 30.04.2024