

TlGaS₂ YARIMKEÇİRİCİ BİRLƏŞMƏSİNDƏ İSTİLİK RƏQSLƏRİNİN QEYRİ-HARMONİKLİK DƏRƏCƏSİ VƏ FONONLARIN SƏRBƏST YOLUNUN ORTA UZUNLUĞU

M.M. QURBANOV, M.M. QOCAYEV, K.M. HÜSEYNOVA

Sumqayıt Dövlət Universiteti,

Sumqayıt, Bakı küçəsi 1, 43-cü məhəllə, AZ-5008

*e-mail: *kama.mag@rambler.ru*

Bu işdə istilik parametrləri arasında əlaqəni müəyyən edən termodinamik münasibətlərdən istifadə etməklə TlGaS₂ yarımkeçirici birləşməsi üçün hesablanmış Debay xarakteristik temperaturu, Qryunayzen parametri, qəfəs istilikkeçirməsi və fononların sərbəst yolunun orta uzunluğunun qiymətlərinin temperatur asılılıqları cədvəl şəklində verilmişdir. Kristal qəfəsin istilik parametrlərinin qiymətlərindəki dəyişiklik, eləcə də fononların sərbəst yolunun orta uzunluğundakı azalması rəqslərin qeyri-harmonikliyi ilə izah edilir. TlGaS₂ – birləşməsində temperaturun artması ilə istilik fononlarının bir-birindən və digər kvazizərrəciklərdən səpilməsinin çoxaldığı göstərilmişdir.

Açar sözlər: yarımkeçirici, izotermik sıxılma, qeyri-harmoniklik dərəcəsi, Debay temperaturu, Qryunayzen parametri

PACS: 71.20 Nr, 63.20Kr, 61.50.Nw

Mürəkkəb yarımkeçiricilərin istilik parametrlərinin temperatur asılılığı izah olunarkən, bu parametrlərin qiymətinin kristal qəfəsin rəqslərinin qeyri-harmoniklik dərəcəsi, bununla əlaqədar yaranan eninə və uzununa akustik fononların iştirak payından necə asılı olması, eləcə də optik fononların rolunun müəyyənləşdirilməsi aktual məsələlərdən sayılır.

Qəfəs istilikkeçirməsinin və fononların sərbəst yolunun orta uzunluğunun qiymətinin eksperimental təyini metodik baxımdan müəyyən çətinliklərlə üzləşdiyindən çox hallarda bu parametrlər, onların daxil olduğu digər termodinamik münasibətlərdən hesablanır. İstilik parametrlərinin qiymətlərinə elektronların verdiyi əlavəni də müəyyən etmək üçün, həmin maddələrdə paralel olaraq elektrik keçiriciliyi də ölçülür. İstilik parametrlərinin qiymətlərində baş verən kəskin artma hallarını çox zaman həmin maddələrdə Qryunayzen parametrinin temperatur asılılığı ilə əlaqələndirirlər. Bu hallarda fonon-fonon səpilməsində optik fononlarında rolu artmış olur [1]. Mövcud ədəbiyyatlarda həmçinin istilik parametrlərinin, termoelektrik hərəkət qüvvəsinin qiymətindən, fononların sərbəst yolunun orta uzunluğundan, elementin atom çəkisindən və atomlararası kimyəvi rəbitədən asılı olduğu da göstərilmişdir [2,3].

Praktik tətbiq baxımından əlverişli hesab edilən termoelektrik materialların seçilməsi zamanı Videman-Frans qanununun ödənilməsi materiallara daha çox üstünlük verilir. Odur ki, bu hallarda istilik parametrlərinin qiymətinin geniş temperatur intervalında təyin olunmasına ehtiyac duyulur.

Bu işdə TlGaS₂ yarımkeçirici birləşməsi üçün istidən genişlənmə əmsalı (α), izotermik sıxılma əmsalı (χ_T), sabit təzyiqdə molyar istilik tutumu (C_P)-nin ədəbiyyatdan götürülmüş eksperimental qiymətləri və bu qiymətlər əsasında hesablanmış Debay xarakteristik temperaturu (θ_D), sabit həcmdə molyar istilik tutumu (C_V), Qryunayzen parametri (γ), qəfəs istilik keçirməsi (χ_L) və fononların sərbəst yolunun orta uzunluğunun (\bar{l}) qiymətləri cədvəl şəklində verilmişdir (cədvəl 1 və 2).

Debay xarakteristik temperaturu, Qryunayzen parametri, sabit təzyiqdə və sabit həcmdə molyar istilik tutumlarının fərqi ($C_P - C_V$), qəfəs istilikkeçiriciliyi və fononların sərbəst yolunun orta uzunluğu mövcud nəzəri və empirik düsturlar vasitəsilə hesablanmışdır. [4, 5, 6].

$$\theta_D = \frac{19.37}{\sqrt{\bar{A}\gamma^{2/3}\alpha}} \quad (1)$$

$$\gamma = \frac{3\alpha V}{\kappa_T C_V} \quad (2)$$

$$C_P - C_V = \frac{9\alpha^2 VT}{\kappa_T} \quad (3)$$

$$\chi_L = \frac{12}{5} L^{\frac{1}{3}} \left(\frac{K}{h}\right)^3 \frac{M\delta\theta_D^3}{\gamma^2 T} \quad (4)$$

$$\bar{l} = \frac{3\chi_L}{\bar{v}C_V} \quad (5)$$

Bu ifadələrdə K -Bolsman sabiti, h -Plank sabiti, M -molyar kütlə, \bar{A} -orta kvadratik atom kütləsi, V -molyar həcm, \bar{v} -kristalda səsin orta sürəti, T -mütləq temperaturdur.

Ədəbiyyatda qeyd edildiyi kimi, bu düsturlar eyni bir elementdən təşkil olunmuş və kubik kristallik quruluşa malik olan maddələr üçün çıxarılmışdır. Lakin ilkin yaxınlaşmada bu düsturlardan yarımkeçirici birləşmələr üçün istifadə etmək olar. [5]. düsturuna daxil olan \bar{v} -nin qiymətində ədəbiyyatda göstərilmiş

$$\bar{v} = (\rho\chi_T)^{1/2} \quad (6)$$

düsturundan təyin edilmişdir [6]. Burada ρ -sıxlıqdır. Vahid həcmə düşən molyar istilik tutumlarının qiyməti 1-ci cədvəldə verilmişdir. Molyar istilik tutumlarının C_V -lərin qiymətlərinin molyar həcmə olan nisbətindən tapılmışdır. Bu qiymətlərdə cədvəl 2-ə verilmişdir.

Cədvəl 1.

T, K	$\alpha, 10^{-6}$ 1/K	$\chi_T, 10^{-12}$ m ² /N	C _p C/mol · K	C _v , C/mol · K	θ_D , K	Γ
80	3,79	6,02	62	64,82	325	2,65
90	4,29	6,27	68	67,89	319	2,72
100	4,75	6,46	71	70,85	302	2,56
120	5,24	6,54	74	73,79	276	2,78
140	6,42	6,62	76	75,64	267	2,85
160	6,92	6,68	78	77,53	258	2,87
180	7,28	6,71	81	80,41	243	2,85
200	9,21	6,74	85	83,96	228	2,91
220	9,45	6,77	88	85,72	225	2,85
240	9,62	6,81	89	87,21	222	2,87
260	9,91	6,83	90	88,23	218	2,83
280	10,23	6,85	91	89,12	215	2,82
300	10,86	6,87	92	89,87	212	2,79

Cədvəl 2.

T, K	χ_l , Vt/sm ² · K	ϑ , m/san	\bar{l} , 10 ⁻⁷ m	C _v · 10 ⁶ C/m ³ · K
80	9,67	5281	3,91	1,40
90	7,72	5280	3,08	1,44
100	6,66	5202	2,56	1,50
120	3,59	5171	1,29	1,60
140	2,65	5138	0,96	1,61
160	2,06	5116	0,73	1,65
180	1,55	5104	0,52	1,71
200	1,11	5093	0,36	1,79
220	1,01	5089	0,32	1,84
240	0,88	5085	0,28	1,85
260	0,79	5082	0,24	1,87
280	0,71	5067	0,21	1,96
300	0,65	5044	0,19	1,97

Cədvəldən göründüyü kimi, TlGaS₂ –birləşməsi üçün həm qəfəs istilik keçiriciliyinin, həm də fononların sərbəst yolunun orta uzunluğu temperaturun artması ilə azalır. Bu dəyişməni onunla əlaqələndirmək olar ki, temperaturun artması ilə fononların bir-birindən və digər kvazizərrəciklərdən səpilməsi də çoxalır. Temperaturun artması ilə eyni zamanda istilik fononlarının sayı da artır.

Alınan nəticələr göstərir ki, TlGaS₂ –birləşməsi üçün fononların sərbəst yolunun orta uzunluğu, birləşməni təşkil edən molekullarası orta məsafədən təqribən 100 dəfə böyük qiymətə malik olur. Bu nəticə analoji kristallik quruluşa malik digər birləşmələrdə olan qiymətlərə tam uyğun gəlir.

Beləliklə, aparılan elmi araşdırma göstərmişdir ki, istilik və elastiklik parametrləri arasında qarşılıqlı əlaqəni müəyyən edən nəzəri və empirik düsturlardan, verilmiş temperatur intervallarında mürəkkəb yarımkeçirici birləşmələr üçün də istifadə oluna bilər.

(2), (4), və (5) ifadələrinə baxsaq görürük ki, qəfəs istilik keçirməsinin qiyməti qeyri-harmoniklik dərəcəsinə ifadə edən Qryunayzen parametrinin kvadratı ilə tərs mütənəsb asılıdır. Başqa sözlə rəqslərin qeyri-harmoniklik dərəcəsinin artımı qəfəs istilikkeçirməsinin qiymətinin kəskin azalmasına səbəb olur. Belə asılılıq cədvəllərdə verilmiş qiymətlərdən də görünür. Beləliklə, qəfəs istilikkeçirməsinin rəqslərin qeyri-harmoniklik dərəcəsi ilə tərs mütənəsb olduğu bir daha təsdiq edilmiş olur.

[1] C.Г. Абдуллаева, А.М. Абдуллаев, К.К. Мамедов, Н.Т. Мамедов. ФТТ, том 26, вып. 2, 1984, с.618-620
 [2] M.M.Qurbanov, M.M.Godjayev, A.M.Akhmedova. Fizika, 2014, vol XX, Num 2, section En., p. 9-11.
 [3] TlGaX₂ (x=S, Se, Te) birləşməsində atomlararası orta kvadratik dinamik yerdəyişmənin Debay xarakteristik temperaturundan asılılığı. SDU Elmi Xəbərləri cild 14, №1, 2014, seh 10-13.

[4] M.M.Qurbanov, S.C. Məmmədov, M.M. Qocayev, F.Ə.Məmmədov. TlGaS₂_{1-x}(TlInS₂)_x (x=0.1; 0,2) bərk məhlullarının istidən genişlənməsi və izotermik sıxılması. SDU Elmi Xəbərləri cild 19, №1, 2019, s. 4-7.
 [5] M.M.Qurbanov, F.Ə.Məmmədov, S.C. Məmmədov. SDU Elmi Xəbərləri cild 21, №1, 2021, seh 4-7

M.M. Qurbanov, M.M. Godjajev, K.M. Huseynova

**DEGREE OF ANHARMONICITY OF THERMAL OSCILLATIONS AND MEAN
FREE PATH OF PHONONS IN TlGaS₂ SEMICONDUCTOR COMPOUND**

In this study, the temperature dependences of the values of the Debye characteristic temperature, Grüneisen parameter, lattice thermal conductivity, and mean free path length of phonons calculated for the TlGaS₂ semiconductor compound using thermodynamic relationships that determine the relationship between thermal parameters are presented in tabular form. The change in the values of thermal parameters of the crystal lattice, as well as the decrease in the average length of the free path of phonons, is explained by the inharmonicity of oscillations. In the TlGaS₂ - compound, it has been shown that the scattering of thermal phonons from each other and from other quasiparticles increases with increasing temperature.

М.М. Курбанов, М.М. Годжаев, К.М. Гусейнова

**СТЕПЕНЬ АНГОРМАНИЧНОСТИ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ И СРЕДНЯЯ ДЛИНА
СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ TlGaS₂**

В настоящей работе представлены температурные зависимости значений характеристической температуры Дебая, параметра Грюнайзена, решеточной теплопроводности и длины свободного пробега фононов, рассчитанные для полупроводникового соединения TlGaS₂ с использованием термодинамических соотношений, определяющих связь между тепловыми параметрами. в табличной форме. Изменение значений тепловых параметров кристаллической решетки, а также уменьшение средней длины свободного пробега фононов объясняется негармоничностью колебаний. Показано, что рассеяние тепловых фононов друг на друге и на других квазичастицах увеличивается с ростом температуры в соединении TlGaS₂.

Qəbul olunma tarixi: 03.05.2023