

ВПЛИВ ВІДХИЛУ ВІД СТЕХІОМЕТРІЇ НА КІНЕТИЧНІ ТА МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПРЕСОВАНИХ КРИСТАЛІВ СЕЛЕНІДУ ВІСМУТУ

С.І. Меньшикова, О.І. Рогачова

*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
olhovskaya.sveta@gmail.com*

Селенід вісмуту (Bi_2Se_3) добре відомий як термоелектричний (ТЕ) матеріал для перетворювачів енергії, які працюють за температур, близьких до кімнатних [1]. На сучасному етапі розвитку науки та техніки значна увага приділяється дослідженню напівпровідникових матеріалів класу V_2VI_3 , які, з одного боку, є відомими термоелектриками, а, з іншого боку, – представниками топологічних ізоляторів [2].

При використанні ТЕ матеріалів на практиці важливим є можливість керування властивостями. Останнє є складною задачею внаслідок того, що властивості Bi_2Se_3 є дуже чутливими до дефектної структури матеріалу [3]. Концентрація власних дефектів в сполуці визначається відхилом від стехіометричного складу та може змінюватися в межах області гомогенності. Тому важливим є вивчення впливу відхилу від стехіометрії на властивості Bi_2Se_3 . Використання на практиці матеріалу саме у пресованому стані має ряд переваг порівняно з литими та монокристалами: пресована заготовка є однорідною та може мати будь-яку форму, також має покращені механічні властивості та знижену ґраткову компоненту теплопровідності, що покращує ТЕ добротність матеріалу.

Мета даної роботи – дослідити вплив відхилу від стехіометрії на кінетичні та механічні властивості пресованих кристалів селеніду вісмуту за кімнатної температури.

Синтез кристалів Bi-Se проводили методом прямого сплавлення елементів високого ступеня чистоти (не менше 99.999% основного компоненту) у вакуумованих кварцових ампулах за температури 1080 К із витримкою в розплаві протягом 3 годин та з наступним ступінчастим відпалом протягом 200 годин при 820 К та протягом 2300 годин при 470 К. Після цього ампули охолоджували до кімнатної температури зі швидкістю вимкненої печі. Порошки для пресування були виготовлені з полікристалів шляхом перетирання в агатовій ступці. Ступінь дисперсності порошків складала 200 мкм. Пресовані зразки було отримано методом холодного пресування під тиском 400 МПа, час витримки під пресом – 60 секунд. Пресовані зразки піддавалися гомогенізуючому відпалу за температури 670 К протягом 250 год. Електропровідність σ та коефіцієнт Холла R_H вимірювали dc методом. Коефіцієнт Зеєбека S вимірювали компенсаційним методом відносно міді. Мікротвердість H вимірювали за Вікерсом на мікротвердомірі ПМТ-3 із індентором в формі алмазної пірамідки із постійним навантаженням 30 г. Похибки вимірювань кінетичних (σ , R_H та S) та механічних (H) властивостей кристалів не перевищували $\pm 5\%$, $\pm 5\%$, $\pm 3\%$ та $\pm 2\%$, відповідно.

Отримано, що пресовані полікристали Bi-Se з вмістом ($59.9 \div 60.0$) ат. % Se мають n-тип провідності, наявність якого пов'язана із значною кількістю вакансій Se, які чинять донорну дію. Встановлено, що залежності σ , R_H , S та H пресованих кристалів Bi_2Se_3 від концентрації надлишкового Bi мають складний немонотонний характер, який пояснюється складними процесами дефектоутворення.

1. D.M. Rowe. Thermoelectrics and its energy harvesting. Vol. 1 “Materials, preparation, and characterization in thermoelectrics”, CRC Press, Boca Raton, USA (2012).
2. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, et al., Nature Physics, 5, 438 (2009).
3. J.-M. Zhang, W. Ming, Z. Huang, G.-B. Liu, et al., Phys. Rev. B, 88, 235131 (2013).