



Рибчаков Д.С.

Рибчаков Д.С.
Сербин М.В.

Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна,
e-mail: anatyach@gmail.com



Сербин М.В.

**КОМП'ЮТЕРНИЙ МЕТОД ОПИСУ
ТЕХНОЛОГІЙ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ
ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ
 Bi_2-Te_3 , ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ БРІДЖМЕНА**

У даній роботі наводяться результати дослідження літературних джерел в яких описуються технології та властивості термоелектричних матеріалів отриманих методом Бріджмена. Наводяться результати одного з етапів створення програмного продукту для опису технологій отримання та властивостей термоелектричного матеріалу на основі сполук $Bi-Te$. Бібл. 8. рис. 2. табл. 1.

Ключові слова: метод Бріджмена, інтерполяція, телурид вісмуту.

Вступ

Термоелектричні матеріали мають великий попит через використання в пристроях для виробництва електроенергії та охолодження. Вони є відмінним рішенням у пристроях активного охолодження у військовому, телекомунікаційному обладнанні та системах контролю температури.

Телурид вісмуту (Bi_2Te_3) – є одним з найкращих термоелектричних матеріалів з найбільшою термоелектричною добротністю (Z), яка у свою чергу, пов'язана з теплопровідністю (κ) та електропровідністю (σ), як представлено у формулі 1

$$Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\kappa}, \quad - \quad (1)$$

де α – коефіцієнт Зеєбека.

Як традиційні методи виготовлення сполук телуриду вісмуту існують методи плавки по Бріджмену, Чохральського та методи зонної плавки, а також методи порошкової металургії, такі як гаряче пресування та гаряча екструзія [1].

Метою даної роботи є: дослідження термоелектричних характеристик твердих розчинів на основі телуриду вісмуту отриманих методом Бріджмена. Застосування модифікованої

комп'ютерної програми з дослідженням методу Бріджмена та характеристик термоелектричних матеріалів на основі сполук $Bi-Te$.

Залежність термоелектричних характеристик матеріалів на основі Bi_2-Te_3 отриманих методом Бріджмена

При отриманні зразків Bi_2Te_3 і його твердих розчинів методом Бріджмена матеріал синтезують, сплавляючи вихідні компоненти у тій же ампулі, в якій в подальшому матеріал буде вирощуватися [2]. Метод Бріджмена полягає у тому що, ампула з кристалізуючою речовиною переміщується в печі з верхньої частини з температурою, що переважає температуру плавлення у нижню частину, температура якої менша за температуру плавлення. Отримані методом Бріджменазлитки Bi_2Te_3 складаються з одного або декількох кристалічних зерен, достатньо великих, щоб з нього можна було вирізати монокристалічні зразки.

У (табл. 1) вказані термоелектричні характеристики матеріалів на основі $Bi-Te$ отримані методом Бріджмена.

Таблиця 1

Термоелектричні характеристики матеріалів на
основі $Bi-Te$ отримані методом Бріджмена.

Робоча температура, К	$Z, 10^{-3}, K^{-1}$	$\alpha, mV/K$	$\sigma, \Omega^{-1}cm^{-1}$	$\kappa, W/m\cdot K$	Тип матеріалу:	Склад матеріалу:	Довжина злитку, мм	Температура розплаву, К	Температура відпау, К	Час відпау, год	Джерело:
308	4.57	-	-	1.21	P	$(Bi_{0.25}Sb_{0.75})_2Te_3$	15	686	473-673	2-5	[3]
308	3.67	-	-	-	N	$Bi_2(Te_{0.94}Se_{0.06})_3$	15				[3]
298	1.27	-	-	1.38	P	$(Bi_{0.25}Sb_{0.75})_2Te_3$	-	-	-	-	[4]
298	1.25	-	-	1.36	N	$Bi_2(Te_{0.94}Se_{0.06})_3$	-	-	-	-	[4]
298	0.91	221	-	1.36	P	$(Bi_{0.25}Sb_{0.75})_2Te_3$	15	-	673	5	[5]
298	1.09	223	-	1.65	N	$Bi_2(Te_{0.94}Se_{0.06})_3$	15	-	673	5	[5]
473	-	-	-	-	P	$Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_{3.0}$	-	923	-	-	[6]

Продовження таблиці 1

300	2.8	17 1	1910	10.2	<i>N</i>	$Bi_2Te_{1.5}Se_{1.5}$	-	-	600	120 0	[7]
300	2.7	16 1	2120	9.5	<i>N</i>	$Bi_{1.9998}Sn_{0.0002}Te_{1.5}Se_{1.5}$	-	-	600	120 0	[7]
300	3	16 3	2320	8.9	<i>N</i>	$Bi_{1.9996}Sn_{0.0004}Te_{1.5}Se_{1.5}$	-	-	600	120 0	[7]

Всі данні в таблиці були впроваджені в програмний продукт для опису технологій та властивостей термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*. Оновлення бази даних програмного продукту буде описано в подальших статтях.

Теорія лінійної інтерполяції

Інтерполювання у загальному розумінні є спосіб обчислення тих чи інших проміжних значень будь-якої досліджуваної величини за набором відомих значень.

Якщо досліджуваний процес можна описати лінійною функцією, процедура розрахунку невідомих параметрів порівняно з іншими випадками розрахунку може бути значно спрощена. Математичне моделювання різних виробничих ситуацій інженерної та наукової практичності методами лінійної інтерполяції передбачає можливість математичного прогнозування через виявлення значення інтерпольованої координати Y за заданим параметром координати X при відомих координатах двох точок лінійної функції.[8]

Для успішного управління потрібно передбачити, як поводитиметься та чи інша система в рамках існуючого описуваного відповідною лінійною функцією процесу. Перша точка лінійної функції має координати X_0, Y_0 , друга – X_1, Y_1 , результативна інтерпольована координата Y , що розраховується, за заданим значенням координати X обчислюється за формулою 2:

$$Y = ((X - X_0) \times (Y_1 - Y_0) \div (X_1 - X_0)) + Y_0, \quad (2)$$

Подальший розвитку програмного продукту для опису технологій та властивостей термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*.

Наразі в програмний продукт для опису технологій отримання та характеристик термоелектричного матеріалу на основі сполук *Bi-Te*, була впроваджена функція теоретичного розрахунку невідомих значень α та δ за допомогою інтерполяції. Загальний алгоритм роботи даної функції наступний.

- Виклик користувачем функції Інтерполяції.
- Створення динамічної форми, та всіх її компонентів, для проведення інтерполяції.
- Після вводу користувачем необхідної робочої температури, програма здійснює пошук в базі даних матеріалу в діапазон робочих характеристик, якого може увійти шукане значення. Для здійснення цього виконується наступний алгоритм рис. 1.

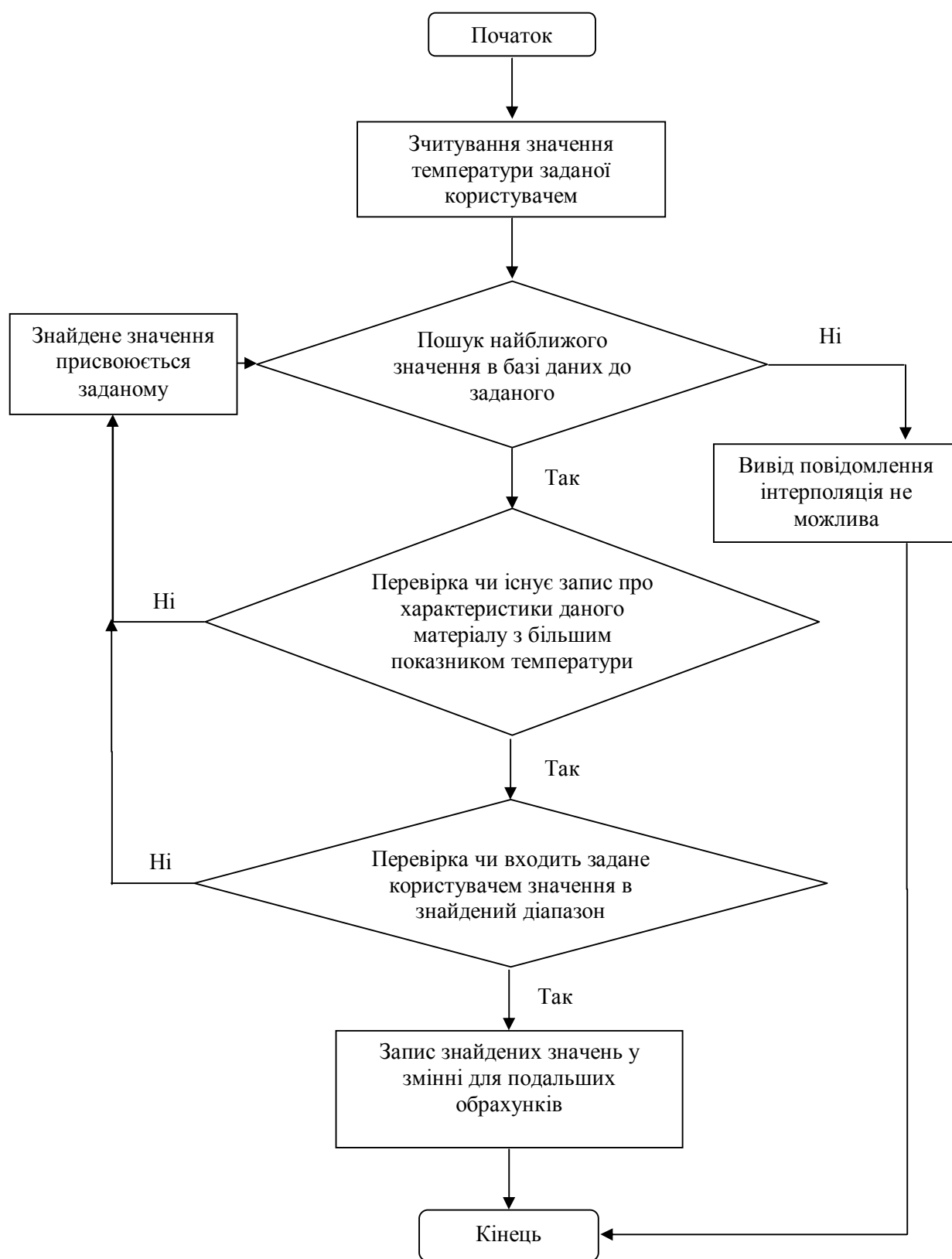


Рис. 1. Алгоритм пошуку оптимального матеріалу для виконання інтерполяції.

- Після підбору оптимального матеріалу програма розраховує значення коефіцієнту α за формулою лінійної інтерполяції.

- На основі отриманого результату програма будує графік залежності α від температури.
- Отримавши результати α програма розраховує значення δ за формулою лінійної інтерполяції.
- На основі отриманого результату програма будує графік залежності δ від температури.
- Отримані результати також виводяться в Label.
- Після завершення роботи користувачем програма видаляє всі компоненти форми та саму форму.

Загальний вигляд вікна інтерполяції значень представлено на рис. 1.

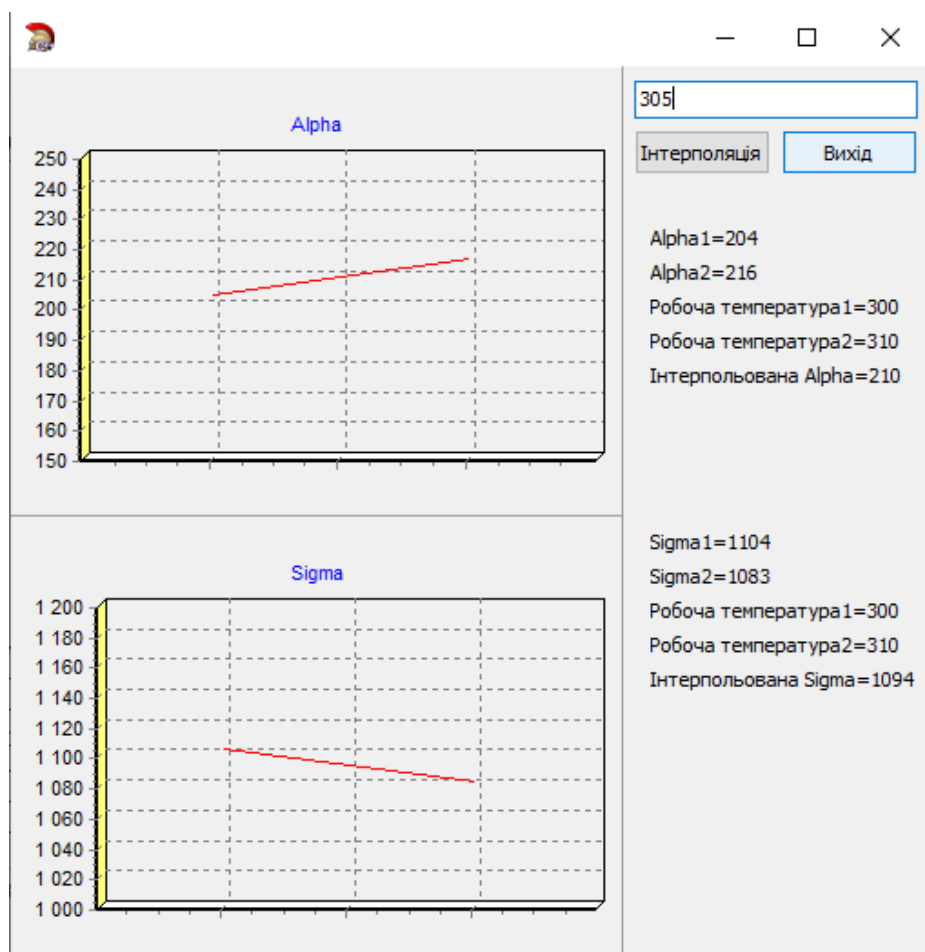


Рис. 2. Загальний вигляд вікна інтерполяції значень.

Подальший розвиток програмного продукту буде описано в майбутніх статтях.

Висновки

1. Проведено дослідження літературних джерел в яких описуються термоелектричні матеріали на основі *Bi-Te* отримані методом Бріджмена.

2. Дані дослідження були додані до бази даних програмного продукту для опису технологій та властивостей отримання термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*.
3. Ведена функція інтерполяції в програмний продукт для опису технологій та властивостей отримання термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*.
4. Подальші версії програмного продукту будуть описані в наступних статтях.

Література

1. O. Yamashita, H. Odahara. Influence of annealing on the distribution of thermoelectric figure of merit in bismuth-telluride ingots. // - 2006. – P. 323-331.
2. Гольцман Б.М., Кудинов Б.А., Смирнов И.А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 . М.: Наука, 1972. 320с.
3. Osamu Yamashita and ShoichiTomiyoshi. Bismuth telluride compounds with high thermoelectric figures of merit. // Journal of Applied Physics. - Vol. 93. – No. 1. – 2003.
4. Osamu Yamashita, Takahiro Ochi, Hirotaka Odahara. Effect of the cooling rate on the thermoelectric properties of *p*-type $(\text{Bi}_{0.25}\text{Sb}_{0.75})_2\text{Te}_3$ and *n*-type $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0.94}\text{Se}_{0.06})_3$ after melting in the bismuth–telluride system. // Materials Research Bulletin.
5. O. Yamashita. High-performance bismuth-telluride compounds with highly stable thermoelectric figure of merit. // Journal of materials science. – 2005. – P. 6439 – 6444.
6. Osamu Yamashita and Shoichi Tomiyoshi. Effect of annealing on thermoelectric properties of bismuth telluride compounds doped with various additives. // Journal of Applied Physics. – Vol. 95. – No. 1. – 2004.
7. Г. Р. Гурбанов, М. Б. Адыгезалова. Электрофизические свойства твердого раствора $\text{Bi}_2\text{Te}_{1.5}\text{Se}_{1.5}$, легированного оловом. // Неорганические материалы. – 2020. – Том 56. – № 6. С. 583–587
8. А.П. Полищук, С. А. Семериков. (1999). Методы вычислений в классах языка C++. Кривой Рог: Издательский отдел КГПИ.

Автори виражають подяку академіку НАНУ Анатичуку Лук'яну Івановичу за запропоновану тему статті.

Надійшли до редакції: 12.07.2021

Рибчаков Д.Е., Сербин М.В.

Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины,
ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина,
e-mail: anatykh@gmail.com

**КОМП'ЮТЕРНИЙ МЕТОД ОПИСУ ТЕХНОЛОГІЙ ТА
ВЛАСТИВОСТЕЙ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ
НА ОСНОВІ Bi_2-Te_3 , ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ БРІДЖМЕНА**

У даній роботі наводяться результати дослідження літературних джерел, в яких описуються технології та властивості термоелектричних матеріалів, отриманих методом Бриджмена. Наводяться результати одного з етапів створення програмного продукту для опису технологій виробництва та властивостей термоелектричного матеріалу на основі сполуки Bi-Te. Бібл. 8. рис. 2. табл. 1.

Ключові слова: метод Бриджмена, інтерполяція, телурид вісмуту.

Rybchakov D.E., Serbyn M.V.

Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine,
e-mail: anatykh@gmail.com

**COMPUTER METHOD OF DESCRIPTION OF THE
TECHNOLOGIES AND PROPERTIES OF Bi_2-Te_3 , BASED
THERMOELECTRIC MATERIALS OBTAINED
BY THE BRIDGMAN METHOD**

This paper presents the results of the study of literary sources describing the technologies and properties of thermoelectric materials obtained by the Bridgman method. The results of one of the stages of creating a software product for the description of the production technologies and properties of a thermoelectric material based on Bi-Te compounds are given. Bibl. 8, Fig. 2, Table 1.

Key words: Bridgman method, interpolation, bismuth telluride.

References

1. Yamashita O., Odahara H. (2006). *Influence of annealing on the distribution of thermoelectric figure of merit in bismuth telluride ingots.*
2. Goltsman B.M., Kudinov B.A., Smirnov I.A. (1972). *Poluprovodnikovye termoelektricheskie materialy na osnove Bi_2Te_3 [Semiconductor thermoelectric materials based on Bi_2Te_3].* Moscow: Nauka [in Russian].

3. Yamashita Osamu and Tomiyoshi Shoichi. (2003). Bismuth telluride compounds with high thermoelectric figures of merit. *Journal of Applied Physics*, 93(1).
4. Osamu Yamashita, Takahiro Ochi, Hirotaka Odahara. Effect of the cooling rate on the thermoelectric properties of p-type $(\text{Bi}_{0.25}\text{Sb}_{0.75})_2\text{Te}_3$ and n-type $\text{Bi}_2(\text{Te}_{0.94}\text{Se}_{0.06})_3$ after melting in the bismuth–telluride system. *Materials Research Bulletin*. – 44(6): 1352-1359.
5. Yamashita O. (2005). High-performance bismuth-telluride compounds with highly stable thermoelectric figure of merit. *Journal of Materials Science*, 6439 – 6444.
6. Yamashita Osamu and Tomiyoshi Shoichi. (2004). Effect of annealing on the thermoelectric properties of bismuth telluride compounds doped with various additives. *Journal of Applied Physics*, 95(1).
7. Gurbanov G.R., Adygezalova M.B. (2020). Electrophysical properties of $\text{Bi}_2\text{Te}_{1.5}\text{Se}_{1.5}$ solid solution doped with tin. *Inorganic Materials*, 56(6), 583–587
8. Polishchuk A.P., Semerikov S.A. (1999). *Calculation methods in C++ language classes*. Kryvyi Rig: Publishing Department of KSPI [in Russian].

Submitted: 12.07.2021