

## ВПЛИВ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ НА ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$

Смітюх Олександр<sup>1</sup>, Марчук Олег<sup>1</sup>, Чернюшок Олександр<sup>2</sup>, Парашук Тарас<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Кафедра неорганічної та фізичної хімії, ВНУ імені Лесі Українки

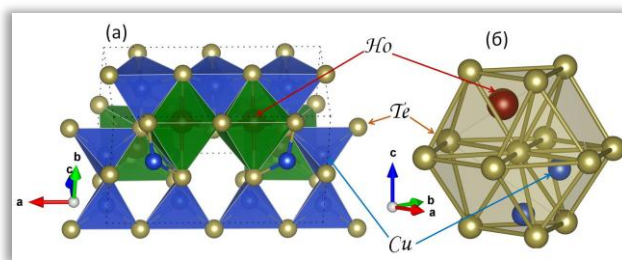
<sup>2</sup> AGH University of Science and Technology, Krakow MP, Poland

[Smitiukh.Oleksandr@vnu.edu.ua](mailto:Smitiukh.Oleksandr@vnu.edu.ua)

Термоелектрика – це галузь науки, що вивчає взаємозв'язок тепла та електричної енергії. Вона має важливе значення для розвитку теплової енергетики та електроніки, оскільки дозволяє перетворювати тепло на електричну енергію та навпаки. Для таких перетворень необхідні матеріали, які мають високий коефіцієнт термоелектричної ефективності. Останнім часом все більше уваги приділяється дослідженню нових матеріалів з термоелектричними властивостями, серед яких є РЗМ-вмісні сполуки. У пропонованій роботі йдеться про структуру, властивості та можливості використання телуриду  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$  у термоелектричних пристроях.

Для синтезу використовували прості речовини (Cu, Ho і Te) з високим ступенем чистоти. Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами: максимальна температура синтезу становила 1320 К, гомогенізуючий відпал за температури 770 К – 240 годин. Після завершення відпалу сплав (без розбивання контейнера) гартували у воду кімнатної температури. Наступним етапом було подрібнення отриманого матеріалу та пресування порошкоподібного продукту у таблетку діаметром 8 мм із наступним її відпалом за температури 700 К. Рентгенограму зразка отримували на дифрактометрі BRUKER D8 Advance ( $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ). Хімічний аналіз відпаленого матеріалу провели використовуючи скануючий електронний мікроскоп (JEOL JSM-6460LV Scanning Electron Microscope).

Візуалізацію кристалічної структури синтезованої сполуки провели використовуючи функціональні можливості програми VESTA [1]. У структурі  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$  (рисунок 1(а)) атоми купруму займають тетраедричні пустоти, а атоми гольмію – октаедричні. На рисунку 1(б) представлено другу координаційну сферу атомів телуру: атоми гольмію центрують ромби, тобто зосереджені в октаедричних пустотах, а атоми купруму – трикутні моноедри і зосереджені в тетраедричних пустотах.

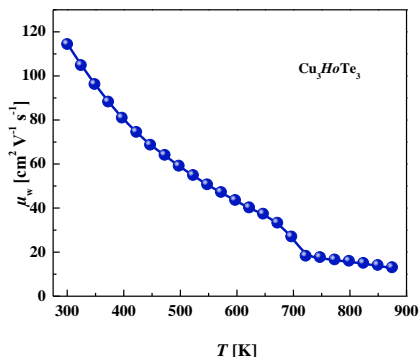


**Рис. 1.** (а) Кристалічна структура телуриду  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$ ;  
(б) друге координаційне оточення атомів Te.

Аналіз другого координаційного оточення дає підстави стверджувати, що лише 1/6 октаедричних і 2/8 тетраедричних пустот є заповненими. Це означає, що під впливом зовнішніх чинників (наприклад температури) можна стимулювати міграцію атомів купруму. Завдяки цьому є можливість регулювання величини  $zT$  (коефіцієнта Зеєбека), що є функцією термоелектричного фактору  $B$ :

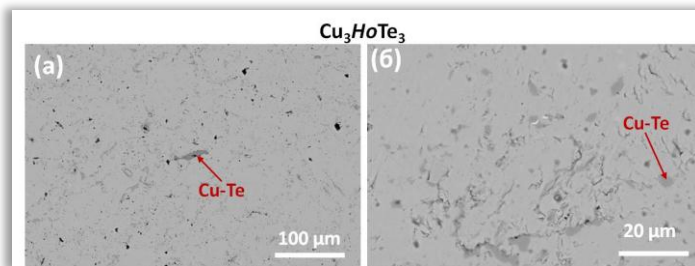
$$B = \frac{8k_B\pi(2m_E)^{\frac{3}{2}}(k_B T)^{5/2} \mu_w}{3eh^3 K_L}$$

Відомо, що у добротних термоелектричних матеріалах рухливість заряджених частинок ( $\mu_w$ ) зменшується з ростом температури. На рисунку 2 представлена залежність  $\mu_w$  від температури для  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$ .



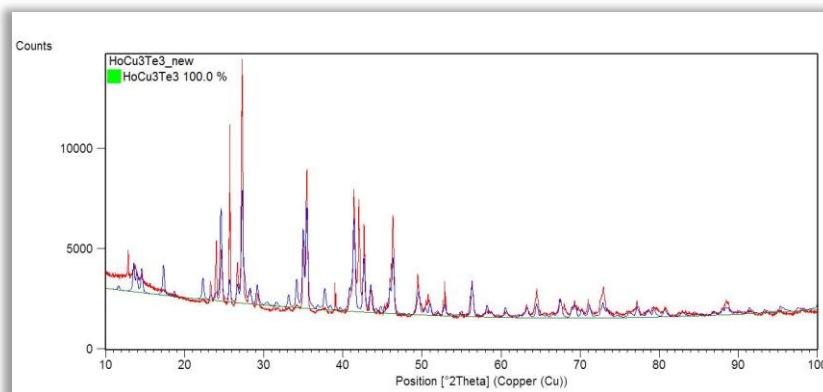
**Рис. 2** Залежність  $\mu_w$  від температури для  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$ .

За результатами проведеного хімічного аналізу встановлено, що компонентний склад синтезованого телуриду відповідає брутто-формулі  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$  (рисунк 3). У синтезованому телуриді виявлено присутність домішкової фази  $\text{Cu}_x\text{Te}_{2-x}$ .



**Рис. 3.** СЕМ-зображення поверхні телуриду  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$ .

Результати X-променевого фазового аналізу (програма X'pert HighScore Plus (рисунк 4)) не підтверджують присутності домішок фази  $\text{Cu}_x\text{Te}_{2-x}$ , а отже їх вміст є меншим 5 %.



**Рис. 4.** Результати X-променевого фазового аналізу зразка  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$ .

Підсумовуючи, зазначимо, що  $\text{Cu}_3\text{HoTe}_3$  можна використовувати для подальших досліджень з метою отримання відомостей про його інші фізичні властивості, які в свою чергу дозволять об'єктивно оцінити сфери та можливості практичного застосування синтезованого телуриду.

Momma K., Izumi F. (2011). VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Cryst.* 44(6), 1272-1276.