

ชื่องานวิจัย

การศึกษาสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไรด์

ชื่อหัวหน้าโครงการวิจัย ผศ.ดร.ทศวรรษ สีตะวัน

ชื่อผู้ร่วมวิจัย

นายहरषกร वर्धनसार

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อคำนวณสมบัติทางไฟฟ้า สมบัติทางความร้อน และวัดสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไรด์ ได้ออกแบบเซลล์สเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$ ด้วยโปรแกรม DV-X α เพื่อคำนวณหาการจัดเรียงพลังงาน ช่องว่างพลังงาน และพลังงานเฟอร์มิของเลดเทลลูไรด์ ได้ออกแบบเซลล์อะตอมขนาด $4 \times 4 \times 4$ เท่าของหน่วยเซลล์ ประกอบด้วย anions-256 และ cations-256 เพื่อคำนวณหาความสัมพันธ์ของอุณหภูมิกับแลตทิซพารามิเตอร์ สภาพยืดหยุ่น การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อน ความจุความร้อน สภาพนำความร้อน และสภาพนำไฟฟ้าของเลดเทลลูไรด์ เลดเซลีนไนด์ เลดเทลลูไรด์ และแคดเมียมเทลลูไรด์ ได้วัดสภาพต้านทานไฟฟ้า สัมประสิทธิ์ซีเบค สภาพนำความร้อน และหาค่าของไดเมนชันเลสฟิเกอร์ออฟเมริทของเลดเทลลูไรด์ ผลการวิจัยพบว่า เลดเทลลูไรด์มีโครงสร้างผลึกแบบ Face Centered Cubic มีการจัดเรียงระดับพลังงานเป็น Pb5d, Pb6s, Pb6p, Te4d, Te5s และ Te5p มีช่องว่างพลังงานจะเท่ากับ 2.28 eV มีพลังงานเฟอร์มิเท่ากับ 0.97 eV และเป็นวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนชนิด n

เลดเทลลูไรด์ เลดเซลีนไนด์ เลดเทลลูไรด์ และแคดเมียมเทลลูไรด์มีค่าแลตทิซพารามิเตอร์ และ Bulk modulus สอดคล้องกับผลการทดลองของ J. E. Ni et al. (exp.) และ F. Ren et al. อย่างดีเยี่ยมมีค่า Bulk modulus ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นที่ปริมาตรและความดันคงตัว ส่วน Shear modulus และ Young's modulus มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องอย่างดีเยี่ยมกับข้อมูลการทดลอง การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อนมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นและสอดคล้องกับการทดลองอย่างดีเยี่ยม มีค่าความจุความร้อนสอดคล้องกับรายงานของ Y. Bencherif et al. (2011) ที่ความดันคงตัว มีค่าสภาพนำความร้อนเนื่องจากแลตทิซหรือโฟนอน $\kappa_L(T)$ ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น เป็นการทำปฏิกิริยาระหว่างโฟนอนกับโฟนอน (Umklapp process) ที่อุณหภูมิสูง สภาพนำไฟฟ้ามีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นแสดงให้เห็นว่าสารประกอบเหล่านี้มีพฤติกรรมเป็นสารกึ่งตัวนำ เลดเทลลูไรด์มีความหนาแน่นเฉลี่ยเป็น 8.12 g/cm^3 และความแข็งแบบวิกเกอร์เฉลี่ยเป็น 35.36 HV

สมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไรด์ที่อุณหภูมิห้องเปรียบเทียบกับรายงานของ Y.L. Pei et al. (2012) มีสภาพต้านทานไฟฟ้าเท่ากับ $3.1 \text{ m}\Omega\text{-cm}$ และมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกัน มีสัมประสิทธิ์ซีเบคเท่ากับ $-194.85 \text{ }\mu\text{V K}^{-1}$ เป็นสารกึ่งตัวนำชนิด n และมีแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกัน มีสภาพนำความร้อนของเท่ากับ $0.49 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ มีแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับสัมประสิทธิ์ซีเบคและมีค่า

มากกว่า และมีโดเมนชั้นเลสฟิเกอร์ออฟเมริทเท่ากับ 2.50×10^{-4} มีแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นและมีค่าน้อยกว่า

Research Title	Study on Thermoelectric Properties of PbTe
Author	Assist. Prof. Dr. Tosawat Seetawan
Co-Author	Mr. Hassakorn Wattanasarn

Abstract

This research project has been objectives to calculate the electrical properties, thermal properties and measured the thermoelectric properties of PbTe. The $\text{Pb}_{13}\text{Te}_{14}$ cluster atom model was designed by DV-X α program to calculate orbital energy, energy gap and Fermi energy of PbTe. The super cluster atom size $4 \times 4 \times 4$ by unit cell composed of anions-256 and cations-256 to calculate the relationship of temperature and lattice parameter, elasticity, linear thermal expansion, heat capacity, thermal conductivity and electrical conductivity of PbS, PbSe, PbTe and CdTe. The electrical resistivity, Seebeck coefficient, thermal conductivity and dimensionless figure of merit of PbTe were measured and evaluated. It results show that, the PbTe crystal structure of face centered cubic, Pb5d, Pb6s, Pb6p, Te4d, Te5s and Te5p orbitals, the energy gap of 2.28 eV, Fermi energy of 0.97 eV and n-type thermoelectric material.

PbS, PbSe, PbTe and CdTe have been the lattice parameter and bulk modulus corresponding well with J. E. Ni et al. (exp.) and F. Ren et al. The bulk modulus was decreased with increasing temperature at volume and pressure constant. The shear modulus and Young's modulus were decreased with increasing temperature corresponding well with experimental. The linear thermal expansion was tendency increased corresponding well with experimental. The heat capacity was corresponded with Y. Bencherif et al. (2011) report at pressure constant. The phonon or lattice thermal conductivity, $\kappa_L(T)$ was decreased with increasing temperature which the reaction of phonon-phonon interaction (Umklapp process) at high temperature. The electrical conductivity was decreased with increasing temperature indicate that semiconductor behavior.

PbTe has been the mean density of 8.12 g/cm^3 and Vickers hardness of 35.36 HV

The relationship between thermoelectric properties and temperature together with Y.L. Pei *et al.* (2012) report were compared. The electrical resistivity of $3.1 \text{ m}\Omega\text{-cm}$ and tendency increased with increasing temperature, Seebeck coefficient of $-194.85 \text{ }\mu\text{V K}^{-1}$ indicate n-type semiconductor and tendency decreased with increasing temperature, thermal conductivity of $0.49 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ more than report and

dimensionless figure of merit of 2.50×10^{-4} tendency decreased with increasing temperature and less than report.