

В ходе выполнения проекта по Соглашению о предоставлении субсидии от 22 июля 2014 г. № 14.578.21.0038 с Минобрнауки России в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» на этапе № 1 в период с 22.07.2014 по 31.12.2014 выполнены в соответствии с "План - графиком исполнения обязательств" следующие работы:

- 1) Анализ научно-технической литературы, относящейся к разрабатываемой теме.
- 2) Проведение патентных исследований в соответствии с ГОСТ Р 15.011-96.
- 3) Выбор и обоснование направлений исследований.
- 4) Математическое моделирование с целью оптимизации конструкции многосекционного термоэлемента. Разработка математической модели.
- 5) Разработка алгоритма программного обеспечения для расчета составной ветви.
- 6) Разработка методов расчета теплового расширения и математическое моделирование теплового расширения многосекционного термоэлемента.
- 7) Разработка математической модели для расчета теплового расширения многосекционного термоэлемента.
- 8) Изготовление низкотемпературных термоэлектрических (т/э) материалов.
- 9) Разработка способов получения, изготовление и исследование омических контактов к низкотемпературным т/э материалам.
- 10) Разработка ЭКД экспериментальных образцов (далее по тексту - ЭО) измерительного комплекса для исследования тепло- и электрофизических параметров.
- 11) Разработка методики для исследования тепло- и электрофизических параметров.
- 12) Исследование тепло- и электрофизических параметров т/э материалов.
- 13) Определение механизма теплопереноса в термоэлектрических материалах.
- 14) Разработка программного обеспечения для реализации математической модели расчета теплового расширения термоэлемента.
- 15) Изготовление ЭО измерительного комплекса для исследования тепло- и электрофизических параметров т/э материалов, структур и устройств на их основе.
- 16) Проведение метрологической аттестации ЭО аппаратно-программного измерительного комплекса для исследования тепло- и электрофизических параметров т/э материалов.
- 17) Разработка структурной схемы ЭО измерительного комплекса для исследования теплового расширения т/э структур.
- 18) Подготовка материалов для публикаций в ведущих научных журналах.

В процессе выполнения 1 этапа получены следующие основные результаты:

- 1) Обоснованы направления проводимых исследований и проведена оценка их эффективности. Определен научно-технический уровень проводимых исследований.
- 2) Проведено математическое моделирование с целью оптимизации конструкции многосекционного термоэлемента. Разработана матмодель расчета ветвей термоэлемента.
- 3) Разработан алгоритм программного обеспечения для расчета составной ветви термоэлемента.
- 4) Разработаны методы расчета теплового расширения анизотропных кристаллических материалов. Получена хорошая корреляция между расчетными и экспериментальными результатами.
- 5) Проведено математическое моделирование теплового расширения многосекционного термоэлемента и разработана математическая модель. Разработано программное обеспечение для реализации указанной математической модели.
- 6) Изготовлены образцы низкотемпературных т/э материалов с использованием различных методов направленной кристаллизации: прессования, зонной плавки и экструзии.
- 7) Разработана методика и измерительный комплекс для исследования тепло- и электрофизических параметров т/э материалов. Исследованы температурные зависимости коэффициентов термоЭДС, электропроводности и теплопроводности полученных низкотемпературных т/э материалов. Установлено, что материалы, полученные зонной плавкой и экструзией,

имеют более высокие значения термоэлектрической добротности. Определены механизмы электро- и теплопроводности в термоэлектрических материалах.

9) Разработаны способы получения омических контактов к низкотемпературным т/э материалам вакуумным нанесением. Определены оптимальные материалы для формирования контактов и режимы их получения. Изготовлены и исследованы омические слои (контакты) к низкотемпературным материалам, имеющим электронный и дырочный тип проводимости. Удельное сопротивление омических контактов не превышает 10^{-10} Ом \times м². Адгезионная прочность контактов до $190 \cdot 10^5$ Па.

10) Разработана структурная схема ЭО измерительного комплекса для исследования теплового расширения т/э материалов и структур на их основе.

Научная новизна результатов, полученных на I этапе проекта заключается в следующем.

1) В результате комплексного исследования тепло- и электрофизических свойств твердых растворов на основе Bi_2Te_3 , установлено влияние различных технологических способов получения этих материалов на их термоэлектрическую эффективность. Определены механизмы электро- и теплопроводности в т/э материалах. Установлено, что на температурный ход электропроводности основное влияние оказывает снижение подвижности носителей тока с ростом температуры. Стабилизация электропроводности в области 500 К, и даже некоторая тенденция к ее возрастанию после 550 К, свидетельствует о частичном снятии вырождения в исследуемых веществах и росте парциального вклада в эффект электропереноса неосновных носителей заряда, что подтверждается так же снижением термоЭДС при этих температурах. Установлено, что электронная теплопроводность в области примесной проводимости составляет (30÷40) % от общей теплопроводности и незначительно изменяется в интервале температур (200÷500) К. Резкое увеличение теплопроводности материалов после 350 К объясняется биполярной термодиффузией, рост которой с температурой носит экспоненциальный характер. Показано, что температурная зависимость параметра Z соответствует температурным изменениями тепло- и электрофизических параметров рассматриваемых материалов.

2) Проведено термодинамическое моделирование и предложены два способа расчета теплового расширения анизотропных кристаллов на основе теллурида висмута вдоль направлений кристаллографических осей « a » и « c »: по аддитивной схеме и на основе новых соотношений, полученных из известного термодинамического выражения Грюнайзена.

3) Обоснованы технологические способы и определены материалы и режимы получения омических контактов к т/э материалам, обладающих низким удельным сопротивлением, не превышающим 10^{-10} Ом \cdot м², и высокой адгезионной прочностью (до $190 \cdot 10^5$ Па). Показано, что высокая адгезионная прочность обусловлена наличием переходного слоя в области контакта металл - термоэлектрический материал, образующегося при взаимодействии металла с компонентами термоэлектрического материала.

4) С целью оптимизации конструкции многосекционного термоэлемента разработана матмодель и алгоритм программного обеспечения для расчета ветвей термоэлемента.

Поставленные и обозначенные в план - графике работ задачи I этапа выполнены в полном объеме. Полученные результаты соответствуют требованиям технического задания проекта.

Большой объем работ, выполненных на первом этапе, и полученные значимые результаты позволили создать надежный задел для успешного выполнения проекта в целом.

Комиссия Минобрнауки России признала обязательства по Соглашению на отчетном этапе исполненными надлежащим образом.