

УДК 531.374; 539.213



Закордонець В.С.

Закордонець В.С. канд. фіз.-мат. наук

Тернопільський національно технічний університет
імені Івана Пулюя, вул. Руська, 56, Тернопіль, 46001,
Україна; e-mail: wladim21@gmail.com

ТЕРМОЕРС В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАДГРАТКАХ ПРИ РОЗСПОВАННІ НОСІЇВ СТРУМУ НА ФОНОНАХ І ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТАХ

В квазікласичному одномізонному наближенні досліджена термоЕРС напівпровідникових надграток (НГ) у випадку довільної статистики та при розсіюванні носіїв струму на акустичних фононах, точкових дефектах і неполярних оптичних фононах з урахуванням зміни часу релаксації в порівнянні з об'ємними матеріалами. Встановлена аналітична залежність термоЕРС від приведеної ширини зони провідності в напрямку осі надгратки. Показано, що термоЕРС надгратки збільшується із збільшенням ширини мінізони провідності, асимптотично наближаючись до граничного значення при $\beta \geq 10$.

Ключові слова: коефіцієнт термоЕРС, добротність надгратки, термоЕРС.

Постановка проблеми

Розвиток сучасної техніки і технологій тісно пов'язаний з пошуком нових джерел енергії, в першу чергу електричної. Основна вимога – збільшити потужність генерації. Однак, в даний час на передній план виходять додаткові умови: енергія повинна вироблятися екологічно чистими відновлюваними джерелами, які не пов'язані з вуглеводами. Термоелектрична енергія є одним із перспективних, а в деяких випадках єдино можливим способом прямого перетворення теплової енергії в електричну. Суттєвим обмеженням термоелектричного перетворення енергії є відносно низький коефіцієнт ефективності перетворення теплової енергії в електричну – від 3 % до 8 % [1]. Ефективність термоелектричного перетворення визначається співвідношенням

$$\eta = \frac{\Delta T}{T_1} \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + 1}, \quad (1)$$

де $\Delta T = T_1 - T_2$, $T = (T_1 + T_2)/2$, T_1 – температура нагрівача, T_2 – температура холодильника,

$$Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\kappa_e + \kappa_{ph}}, \quad (2)$$

добротність термоелектричного матеріалу, σ , – коефіцієнт термоЕРС, κ_e , і κ_{ph} – коефіцієнти, електропровідності, електронної і граткової теплопровідності.

Аналіз останніх досліджень і публікацій.

Високоєфективні термоелектричні перетворювачі енергії потребують великої термоелектричної добротності, яка для об'ємних матеріалів наблизилася до граничної величини $ZT=1$ [2]. Однак низькорозмірні системи можуть подолати цю границю. В роботах [3 – 5] показано, що термоелектрична добротність надграток (НГ) з досить вузькими квантовими ямами (КЯ) може значно перевищувати добротність масивних напівпровідникових зразків, склад яких аналогічний складу матеріалу НГ.

В зв'язку з цим, особлива увага приділяється дослідженню явищ переносу в напівпровідникових надгратках. Зокрема, велика кількість теоретичних [6 – 9] і експериментальних [10,11] робіт присвячена дослідженню термоЕРС. До надграток належать плоско шарові кристали дихалькогенідів перехідних металів і їх з'єднання, напівпровідники групи A_3B_6 , політипні напівпровідникові з'єднання та ін. [11 – 13].

В [3 – 5] з використанням простого параболічного закону дисперсії в одномізонному наближенні показано, що в $2D$ -структурах можливе суттєве в порівнянні з $3D$ -структурами збільшення термоЕРС. При цьому вважалось, що розмірне квантування не приводить до зміни часу релаксації і рухливості носіїв в напрямку перпендикулярному до площини шарів, в порівнянні з об'ємними матеріалами. Збільшення термоЕРС пов'язувалося лише із збільшенням густини квантових станів поблизу країв зон розмірного квантування. ТермоЕРС НГ з використанням квазідвомірного енергетичного спектра в наближенні тензора часу релаксації при розсіюванні носіїв струму на фонах різного типу з використанням косинусоїдального закону дисперсії і виродженої статистики досліджувалася в [9], однак при цьому вплив ширини мінізони провідності на величину термоЕРС в напрямку осі НГ не розглядался.

Метою роботи є дослідження термоЕРС напівпровідникових надграток в квазікласичному одномізонному наближенні при розсіюванні носіїв струму на акустичних фонах, точкових дефектах і неполярних оптичних фонах при довільній статистиці та з врахуванням зміни часу релаксації в $2D$ -структурах в порівнянні з об'ємними матеріалами.

Постановка задачі

Виклад основного матеріалу. В напівпровідникових надгратках крім періодичного потенціалу кристалічної ґратки існує додатковий одномірний потенціал, період якого суттєво перевищує постійну ґратки. Наявність потенціалу надгратки суттєво змінює енергетичний спектр, завдяки чому можна довільним чином змінювати її зонну структуру. Фізичні властивості напівпровідникових НГ визначаються їх електронним спектром. В той час, як рух носіїв струму в напрямку перпендикулярному осі НГ майже вільний і відповідає руху по широкій зоні провідності, рух вздовж її осі $0z$ обмежений.

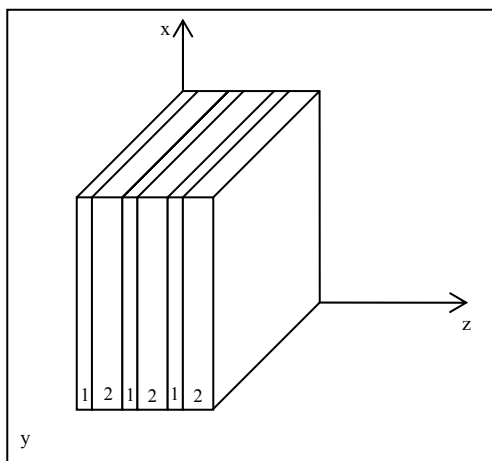


Рис. 1 Схематична будова напівпровідникової надгратки.
1 – шар GaAs. 2 – шар AlAs.

В цьому напрямку електронний спектр буде мати мінізонний характер. У випадку достатньо вузьких шарів, які являють собою квантові ями для електронів, всі електрони будуть знаходитися поблизу дна нижньої мінізони розмірного квантування.

В рамках квазікласичного наближення

$$2\varepsilon_0 \gg \hbar/\tau_{2D}, eE_0, a\nabla_z k_0 T, \quad (2)$$

закон дисперсії електронів в нижній мінізоні НГ має вигляд [13]

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + 2\varepsilon_0(1 - \cos k_z a) \quad (3)$$

де $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, і k_z – поперечна і поздовжня до осі НГ компоненти квазіхвильового вектора, m_{\perp} – поперечна ефективна маса, близька по величині до ефективної маси m^* електронів напівпровідника, який формує НГ, a – період НГ, $2\varepsilon_0$ – ширина зони провідності НГ в напрямку k_z .

Поздовжню складову тензора часу релаксації електронного газу в НГ запишемо у вигляді [15]

$$\tau_{2D} = \frac{2\sqrt{2m_{\perp}k_0T}}{3\pi\hbar} a\tau_{3D} \left(\frac{\varepsilon}{k_0T} \right)^{1/2}, \quad (4)$$

де

$$\tau_{3D} = \tau_0 \left(\frac{\varepsilon}{k_0T} \right)^{r-1/2}, \quad (5)$$

де τ_{3D} – час релаксації в об'ємному зразку, τ_0 – незалежна від енергії електрона постійна, r – параметр розсіювання. Величини τ_0 , і r для різних механізмів розсіювання наведені в [16]. Очевидно, що відмінності в степеневій залежності часу релаксації об'ємного зразка – $(r^{-1/2})$ і надгратки – r , виникають внаслідок різної енергетичної залежності густини квантових станів.

Відомо, що при розсіюванні носіїв струму на акустичних фононах, точкових дефектах і неполярних оптичних фононах в області високих температур, величина параметра розсіювання однакова, і рівна $r = 0$. Зрозуміло, що при дії вказаних механізмів розсіювання поздовжня складова тензора часу релаксації від енергії не залежить. Аналогічні припущення зроблені в [17] і ряді інших робіт (див. посилання в цій же роботі). Найбільш переконливим аргументом на користь цього твердження є результати роботи [10], в якій експериментально встановлено, що в НГ GaAs/AlAs вище температури 40 К час релаксації $\tau = \text{const}$.

Нерівноважну функцію розподілу електронів f знайдемо в наближенні часу релаксації із кінетичного рівняння Больцмана

$$v \frac{\partial f}{\partial r} - e\vec{E}_0 \frac{\partial f}{\hbar \partial k} = -\frac{f_1}{\tau_{2D}}, \quad (6)$$

де $\vec{v} = \hbar^{-1} \partial \varepsilon(\vec{k}) / \partial \vec{k}$ - швидкість електрона, $\vec{E}_0 = -\partial \varphi / \partial \vec{r}$ - напруженість електричного поля, φ - електричний потенціал, $f_1 = f - f_0$, $f_0 = [1 + \exp(\varepsilon - \zeta) / k_0 T]$ - рівноважна функція розподілу Фермі-Дірака із змінною в просторі температурою T і хімічним потенціалом ζ , k_0 - постійна Больцмана.

Розв'язуючи (6) в наближенні часу релаксації для нерівноважної добавки до функції розподілу отримуємо

$$f_1 = -\tau_{2D} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left[\frac{\varepsilon - \zeta}{T} \vec{v} \cdot \nabla T - e \vec{v} \cdot \nabla \left(\varphi - \frac{\zeta}{e} \right) \right], \quad (7)$$

Густину струму знайдемо із співвідношення

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \vec{v}(\vec{k}) \cdot f_1(\vec{k}, \vec{r}) d\vec{k}, \quad (8)$$

Вважаємо, що вектори \vec{E}_0 і ∇T направлені вздовж осі НГ яку сумістимо з віссю циліндричної системи координат θz . Тоді, з врахуванням (7) для густини струму отримуємо

$$j = j_z = \sigma(\eta, \beta) \cdot \nabla_z \left(\frac{\zeta}{e} - \varphi \right) - \alpha(\eta, \beta) \cdot \sigma(\eta, \beta) \nabla_z T \quad (9)$$

де $\alpha(\eta, \beta)$ і $\sigma(\eta, \beta)$ - коефіцієнти термоЕРС і електропровідності вздовж осі НГ.

Коефіцієнт термоЕРС визначимо із співвідношення [16]

$$\alpha(\eta, \beta) = -\frac{\nabla_z \left(\frac{\zeta}{e} - \varphi \right)}{\nabla_z T}. \quad (10)$$

Покладаючи густину струму в співвідношенні (9) рівним нулю, для коефіцієнта термоЕРС отримуємо

$$\alpha(\eta, \beta) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{I_{1,2,0}(\eta, \beta) + \beta I_{0,2,2}(\eta, \beta)}{I_{0,2,0}(\eta, \beta)} - \eta \right]. \quad (11)$$

де

$$I_{k,l,m}(\eta, \beta) = \int_0^\pi F_k(\eta, z, \beta) \cdot (\sin z)^l \left(\sin \frac{z}{2} \right)^m dz, \quad (12)$$

$$F_k(\eta, z, \beta) = \int_0^\infty \frac{\exp\left(x - \eta + \beta \cdot \sin^2 \frac{z}{2}\right)}{\left[1 + \exp\left(x - \eta + \beta \cdot \sin^2 \frac{z}{2}\right)\right]^2} x^k dx, \quad (13)$$

трьохпараметричні інтеграли Фермі $\varepsilon_{\perp} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_{\perp}$, $x = \varepsilon_{\perp} / k_0 T$ – приведена енергія, $\eta = \zeta / k_0 T$ – приведений хімічний потенціал, $\beta = 2\varepsilon_0 / k_0 T$ – приведена ширина мінізони провідності в напрямку осі надгратки, $z = ak_z$.

На рис. 2 і рис. 3 приведені результати числового аналізу отриманих співвідношень

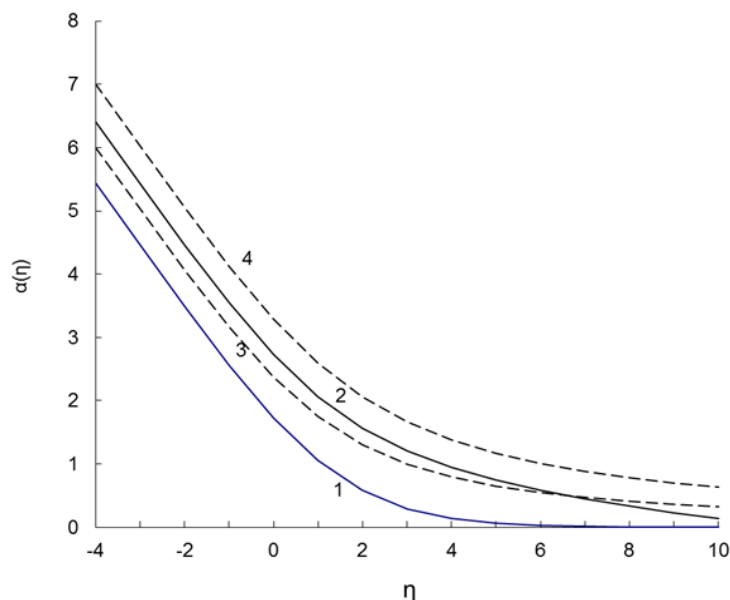


Рис.2 Залежність термоЕРС від хімпотенціалу при різних значеннях ширини мінізони провідності в напрямку осі НГ. 1 – при $\beta = 1$, 2 – при $\beta = 10$.

Штрихові криві відповідають розсіюванню носіїв струму в об'ємному матеріалі: на акустичних фононах – 3; на полярних оптичних фононах – 4.

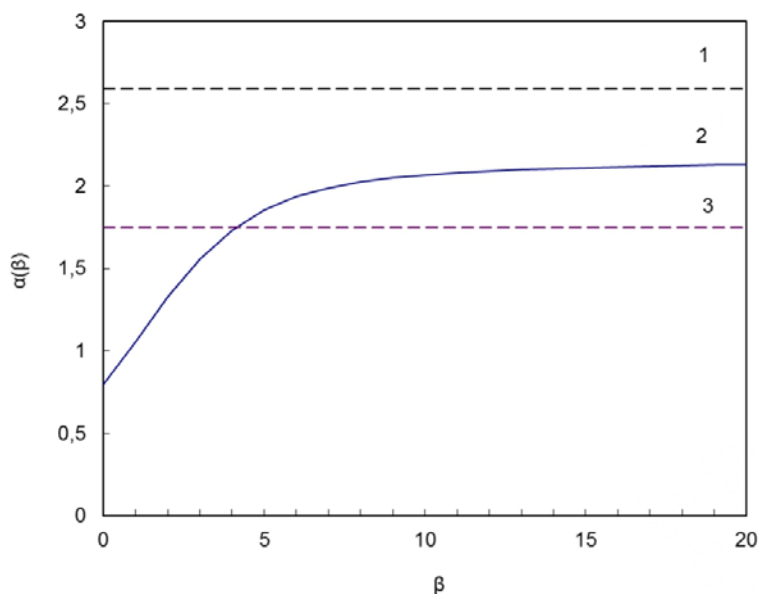


Рис.3 Залежність термоЕРС від ширини мінізони провідності в напрямку осі НГ при $\eta = 2$.

Штрихові лінії 1 і 3 відповідають розсіюванню носіїв в об'ємному матеріалі:

1 - на акустичних фононах; 3 - на полярних оптичних фононах.

Як випливає з аналізу співвідношення (11), при зменшенні товщини шарів надгратки ширина мінізони провідності в напрямку k_z зменшується, що приводить до зменшення коефіцієнта термоЕРС. Якщо $\beta \rightarrow 0$, величина коефіцієнта термоЕРС асимптотично наближається до граничного значення

$$\alpha(\eta, 0) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{F_1(\eta)}{F_0(\eta)} - \eta \right], \quad (14)$$

а у випадку $\beta \rightarrow \infty$ до

$$\alpha(\eta, \infty) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{F_{5/2}(\eta)}{F_{3/2}(\eta)} - \eta \right], \quad (15)$$

де

$$F_k(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\exp(x-\eta)}{[1 + \exp(x-\eta)]^2} x^k dx, \quad (16)$$

однопараметричні інтеграли Фермі k – того порядку [16].

Необмежене збільшення β слід розглядати як наближення ширини мінізони провідності в напрямку k_z до ширини зони провідності в напрямку k_{\perp} . При цьому рух електронів вздовж осі НГ наближається до вільного.

Якщо $\eta < -4$ електронний газ НГ буде невідродженим, а (14) і (15) перетворяться до вигляду відповідно:

$$\alpha(\eta, 0) = -\frac{k_0}{e} [1 - \eta]; \quad (17)$$

і

$$\alpha(\eta, \infty) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{5}{2} - \eta \right]. \quad (18)$$

Для масивного напівпровідника, склад якого аналогічний складу матеріалу НГ при $\eta < -4$ співвідношення (11) переходить у відому формулу Писаренко [16]

$$\alpha(\eta, \infty) = -\frac{k_0}{e} [2 - \eta]. \quad (19)$$

Висновки

В результаті розрахунку числовими методами на рис. 2 і рис. 3 представлені графічні залежності термоЕРС (в одиницях $-k_0/e$) від хімпотенціалу і ширини мінізони провідності в напрямку осі $0z$ (в одиницях k_0T) для НГ і об'ємного матеріалу. Аналіз показує, що виродження електронного

газу НГ наступає тим швидше, чим вужча ширина мінізони провідності в напрямку її осі. Очевидно, що це пов'язано із зменшенням загальної кількості квантових станів в зоні провідності. Крім того, при $\beta \ll 5$ термоЕРС НГ менша ніж термоЕРС об'ємних зразків, виготовлених із того ж матеріалу. При збільшенні ширини мінізони провідності термоЕРС НГ збільшується, асимптотично наближаючись до граничного значення при $\beta \geq 10$ в об'ємних зразках, що цілком очевидно, оскільки в цьому випадку стеля зони провідності в напрямку осі $0z$ перестає відігравати будь яку роль. Ясно, що в рамках прийнятих припущень термоЕРС від періоду напівпровідникової НГ не залежить. Це пояснюється видом закону дисперсії і характером енергетичної залежності часу релаксації.

Хоча зменшення ширини мінізони провідності в напрямку осі НГ приводить до зменшення термоЕРС, існує ряд факторів, які позитивно впливають на її збільшення. Наприклад ефект електрон-фононного захоплення, який в напівпровідникових надструктурах в області низьких температур може відігравати визначальну роль [17]. Крім того, деяке зменшення термоЕРС в порівнянні з об'ємними матеріалами не виключає збільшення термоелектричної добротності НГ в цілому, за рахунок зменшення граткової складової теплопровідності викликаної інтенсивним розсіюванням фононів на границях шарів.

Література

1. Л.И.Анатычук. Термоэлементы и термоэлектрические устройства. Справочник. Киев: Наукова думка, 1979. – 385 с.
2. Л.П. Булат, В.С. Закордонец ФТП 29, **10**, 1743 (1995).
3. L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit // Phys. Rev. **B47**, 12727 (1993).
4. L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor // Phys. Rev. **B47**, 16631 (1993).
5. L.D. Hicks, T.C. Harman, X Sun, M.S. Dresselhaus. Experimental study of the effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit // Phys. Rev. **B53**, 10493 (1996).
6. А.Я. Шик ФТП 7, 2, 261 (1973).
7. Б.М. Аскеров, Н.М. Гашимзаде, М.М. Панахов Недиссипативные термомагнитные явления в квантовых сверхрешетках // ФТТ 29, **3**, 818 (1987).
8. А.С. Булыгин, Г.М. Шмелев, И.И. Маглеванный Дифференциальная термоэдс сверхрешетки в сильном электрическом поле // ФТТ 41, **7**, 1314 -1316 (1999).
9. Б.М. Аскеров, Б.И. Гулиев, С.Р. Фигарова, И.Р. Гадирова ТермоЭДС в квазидвумерных системах при рассеянии носителей тока на фонах // ФТТ 39, **10**, 1857 (1997).
10. H.T. Grahn, K. von Klitzing, K. Ploog, G.H. Döhler. Phys. Rev. **B 43**, 14, 12095 (1991).
11. R. Fletcher, P.T. Coleridge, Y. Feng. Phys. Rev. **B 52**, 4, 2823 (1995).
12. Л.Н. Булаевский. Сверхпроводимость и электронные свойства слоистых соединений // УФН **116**, 3, 449 -483 (1975).
13. Б.А. Тавгер, В.Я. Демиховский. Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках // УФН **96**, 1, 61 – 86(1968).
14. А.П. Силин Обзоры актуальных проблем // УФН **147**, 3, 485 – 521 (1985).
15. Д.А. Пшеная-Северин, Ю.И.Равич. Расчет подвижности и термоэлектрической эффективности многослойных структур с квантовыми ямами // ФТП 36, **8**, 974 - 980(2002).
16. Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. М.:Наука. 1985, с.320

17. Ф.Г. Басс, В.С. Бочков, Ю.Г. Гуревич. Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М.:Наука. 1984, с.287

Надійшла до редакції 24.02.2021

Закордонец В.С., канд. физ.-мат. Наук

Тернопольский национальный технический университет
имени Ивана Пулюя, ул. Русская, 56, Тернополь, 46001,
Украина; e-mail: wladim21@gmail.com

**ТЕРМОЭДС В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ
ПРИ РАССЕЯНИИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА НА ФОНОНАХ
И ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТАХ**

В квазиклассическом одноминзонном приближении исследована термоЭДС полупроводниковых сверхрешеток (СР) в случае произвольной статистики и при рассеянии носителей тока на акустических фононах, точечных дефектах и неполярных оптических фононах с учетом изменения времени релаксации по сравнению с объемными материалами. Установлена аналитическая зависимость термоЭДС от приведенной ширины зоны проводимости β в направлении оси сверхрешетки. Показано, что термоЭДС сверхрешетки увеличивается с увеличением ширины минизоны проводимости, асимптотически приближаясь к предельному значению при $\beta \geq 10$.

Ключевые слова: коэффициент термоЭДС, добротность сверхрешеток, термоЭДС.

V. Zakordonets, Cand. of Phys. and Math. Sciences

Ternopil National Technical University
named after Ivan Pulyuy, st. Russian, 56, Ternopil,
46001, Ukraine; e-mail: wladim21@gmail.com

**THERMOPOWER IN SEMICONDUCTOR
SUPERLATTICES AT SCATTERING OF CURRENT
CARRIERS BY PHONONS AND POINT DEFECTS**

In the quasi-classical one-miniband approximation, the thermopower of semiconductor superlattices (SL) is investigated in the case of arbitrary statistics and at scattering of charge carriers by acoustic phonons, point defects, and nonpolar optical phonons, taking into account the change in the relaxation time as

compared to bulk materials. An analytical dependence of the thermopower on the reduced width of the conduction band β in the direction of the superlattice axis is established. It is shown that the thermopower of the superlattice increases with an increase in the width of the conduction miniband, asymptotically approaching the limiting value at $\beta \geq 10$.

Key word: Seebeck coefficient, superlattice figure of merit, thermoEMF.

References

1. L.I. Anatyshuk (1979). *Termoelementy i termoelektricheskiie ustroistva. Spravochnik. [Thermoelements and thermoelectric devices. Handbook]*. Kyiv: Naukova dumka [in Russian].
2. Bulat L.P., Zakordonets V.S. (1995). *Semiconductors*, 29 (10), 1743.
3. Hicks L.D., Dresselhaus M.S. (1993). *Phys. Rev.* B47, 12727.
4. Hicks L.D., Dresselhaus M.S. (1993). *Phys. Rev.* B47, 16631.
5. Hicks L.D., Harman T.C., Sun X., Dresselhaus M.S. (1996). *Phys. Rev.* B53, 10493.
6. Shick A.Ya. (1973). *Semiconductors*, 7(2), 261.
7. Askerov B.M., Gashimzade N.M., Panakhov M.M. (1987). *Semiconductors* 29(3),818.
8. Bulygin A.S., Shmelyov G.M., Maglevannyi I.I. (1999). *Semiconductors* 41(7), 1314.
9. Askerov B.M., Guliev B.I., Figarova S.R., Gadirova I.R. (1997). *Semiconductors*, 39(10), 1857.
10. Grahn H.T., von Klitzing K., Ploog K., Döhler G.H. (1991). *Phys. Rev.* B 43, 14, 12095.
11. Fletcher R., Coleridge P.T., Feng Y. (1995). *Phys. Rev.* B 52, 4, 2823.
12. Bulayevskii L.N.(1975). *Uspekhi fizicheskikh nauk – Advances in Physical Sciences*, 116 (3), 449 [in Russian].
13. Tavger B.A., Demikhovskii V.Ya. (1968). *Uspekhi fizicheskikh nauk – Advances in Physical Sciences*, 96(1), 61[in Russian].
14. Silin A.P. (1985). *Uspekhi fizicheskikh nauk – Advances in Physical Sciences*, 147(3), 485 [in Russian].
15. Pshenai-Severin D.A., Ravich Yu.I. (2002). *Semiconductors*, 36(8), 974.
16. Askerov B.M. (1985). *Elektronnyie yavleniia perenosa v poluprovodnikakh [Electronic transport phenomena in semiconductors]*. Moscow: Nauka [in Russian].
17. Bass F.G., Bochkov V.S., Gurevich Yu.G. (1984). *Elektrony i phonony v ogranichennykh poluprovodnikakh [Electrons and phonons in confined semiconductors]*. Moscow: Nauka [in Russian].

Submitted 24.02.2021