

УДК 621.315.592

Ігор Юрчишин, Олег Надрага

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК IV-VI

Здатність наноструктурованих матеріалів підвищувати термоелектричну (ТЕ) добротність привертає все більшу увагу [1].

Метою даної роботи було теоретичне пояснення особливостей поведінки ряду термоелектричних (ТЕ) параметрів від ширини квантових ям (КЯ) халькогенідів свинцю (PbS, PbSe, PbTe) вирощених на підкладках KCl і покритих захисним шаром EuS.

У моделі КЯ з високими стінками вирази для коефіцієнта Зеебека S та електропровідності σ можна записати як [2]:

$$S = \frac{k_B}{e} \left[\frac{E_F}{k_B T} - \frac{A_1 + A_2}{A_3} \right] \quad (1)$$

$$\sigma = \frac{1}{2\pi d} \frac{2k_B T}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m_x^*}{m_y^*}} e^2 \tau_0 A_3 \quad (2)$$

$$A_1 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x^2 \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (3)$$

$$A_2 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} E'_n \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (4)$$

$$A_3 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (5)$$

де f_n - функція розподілу Фермі, $x = \varepsilon / k_B T$ - понижена енергія носія, $\eta_n = \xi - E'_n$. Тут $\xi = E_F / k_B T$ і $E'_n = E_n / (k_B T)$, k_B - стала Больцмана.

У даній моделі розраховано залежності енергії Фермі та ефективної маси від ширини КЯ. На їх основі досліджено характер зміни періоду осциляцій густини станів з ростом ширини ями. На основі співвідношень енергії Фермі та ефективної маси носіїв з шириною ями побудовано d -залежності коефіцієнта Зеебека, електропровідності та коефіцієнта ТЕ потужності (рис. 1).

При використанні даної моделі для опису поведінки ТЕ коефіцієнтів у наноструктурах PbTe, PbSe, PbS при 300 К ширина КЯ у теоретичній моделі вважалася рівною товщині конденсату в експериментальних залежностях відповідних параметрів. Отримані залежності ТЕ коефіцієнтів від ширини КЯ халькогенідів свинцю характеризуються немонотонною осциляційною поведінкою.

Дані обчислення проводились в наближенні сталої концентрації і рухливості носіїв n -типу на всьому діапазоні ширини ями, які підбиралися виходячи з

відповідних експериментальних вимірювань на досліджуваному діапазоні товщин конденсату [3-5]. Залежності ТЕ параметрів від ширини ями для різних сполук з ряду халькогенідів свинцю відрізняються середніми значеннями цих параметрів на всьому досліджуваному діапазоні, а також величиною і положенням точок екстремуму. Для всіх сполук халькогенідів свинцю при малих значеннях ширини ями (менше 20 нм) виявлено аномально високі значення коефіцієнта Зеебека та дуже низькі значення електропровідності. Збільшення ширини ями приводить до зниження величини коефіцієнта Зеебека та до збільшення величини електропровідності. При цьому всі криві виходять на насичення. Зазначимо, що такий хід кривих повністю відповідає експериментальним даними [3-5], що свідчить про правильність зроблених припущень щодо природи немонотонного ходу експериментальних кривих.

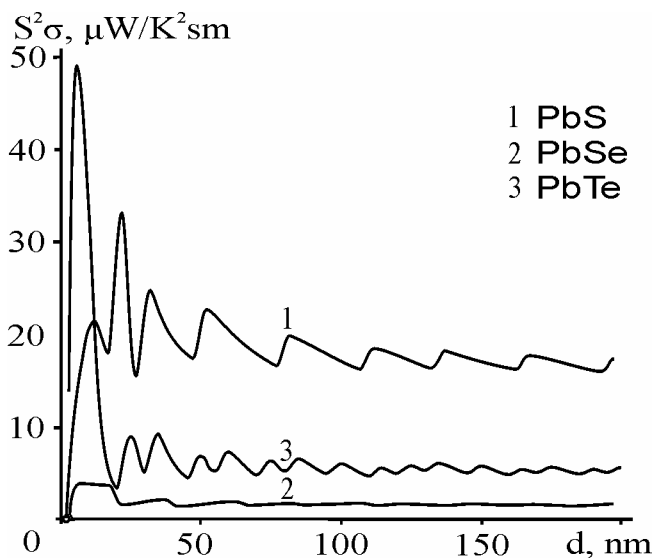


Рисунок 1 - Теоретична залежність коефіцієнта ТЕ потужності $S^2\sigma$ від ширини КЯ PbS, PbSe, PbTe в моделі безмежно глибокої потенціальної ями при $T = 300$ К.

Робота виконана в рамках держбюджетних тем № 0111U001766 МОНМС України, № 0111U004951 ДФФД МОНМС України та № 0110U006281 НАН України.

1. D.M. Freik, Yurchyshyn I.K., Chobaniuk V.M., Nykyrui R.I., Lysiuk Yu.V., *Physical sensors* **8**, 41 (2011).
2. *CRC Handbook of Thermoelectrics*, ed. D.M. Rowe (CRC Press, 1995).
3. E.I. Rogacheva, O.N. Nashchekina, Y.O. Vekhov, M.S. Dresselhaus, S.B. Cronin, *Thin Solid Films* **423**, 115 (2003).
4. E.I. Rogacheva, T.V. Tavrina, O.N. Nashchekina, S.N. Grigorov, K.A. Nasedkin, M.S. Dresselhaus, S.B. Cronin, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2690 (2002).
5. Rogacheva E.I., Nashchekina O.N., Grigorov S.N., Dresselhaus M.S., Cronin S.B., *Nanotechnology* **14**, 53 (2003).