

КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

Фреик Д.М.⁽¹⁾, Чобанюк В.М.⁽¹⁾, Юрчишин И.К.⁽¹⁾, Лисюк Ю.В.⁽¹⁾

Физико-химический институт Прикарпатского национального университета
имени Василя Стефаника, ул. Шевченка, 57, Ивано-Франковск, 76018,
Украина, email: freik@pu.if.ua

Создание высокоэффективных термоэлектрических материалов привело к интенсификации научной деятельности в области низкоразмерных структур [1]. В статье представлен анализ новых подходов к повышению добротности ZT для наноструктур на основе соединений IV-VI. Определены оптимальные термоэлектрические характеристики сверхрешеток квантовых точек, проволок и ям.

Понижение размерности материала создает условия для наблюдения явления квантово-размерного эффекта, что приводит к увеличению плотности состояний вблизи энергии Ферми. Это помогает сохранить высокую проводимость при относительно низкой энергии Ферми, где имеют место высокие значения коэффициента Зеебека S . Значительное влияние квантовых эффектов на термоэлектрические свойства возможно только, если размеры структуры в направлении ограничения сравнимы с длиной волны де Бройля носителей. Это условие выполняется для структур в виде квантовых ям, квантовых проволок и квантовых точек, в которых имеет место размерное ограничение по одному, двух и трем направлениям, соответственно. Таким образом, плотность электронных состояний демонстрирует заметное отклонение от обычного параболического закона в массивных материалах.

Поведение термоэлектрических параметров (электро- и теплопроводности, коэффициента Зеебека) в массивных материалах, как правило, описывается в терминах электронных и фононных свойств, которые значительно варьируются по мере уменьшения размера образца ниже микрометрового диапазона, где квантовые эффекты становятся более значительными. Пространственное ограничение акустических фононов и соответствующая модификация групповой скорости ведет к увеличению скорости релаксации фононов, что приводит к снижению решеточной теплопроводности. Кроме того сильно изменяется характер

взаимодействия между частицами. Принятие во внимание наличие многих энергетических зон в структуре типа квантовой ямы может привести к немонотонному изменению различных транспортных коэффициентов, таких как подвижность, коэффициентны Зеебека и Холла.

Толстотные зависимости кинетических параметров квантовых ям (КЯ) на основе соединений IV-VI демонстрируют немонотонное осцилляционное поведение, связанное с размерным квантованием за счет ограничения на передвижение носителей в одном направлении.

На основе теоретической модели прямоугольной квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами исследованы толстотные зависимости термоэлектрических параметров наноструктур соединений IV-VI (PbTe, PbSe, PbS, SnTe). Теоретически показано, что в таких структурах имеет место немонотонное, колебательное изменение коэффициента мощности $S^2\sigma$ с шириной ямы. Определена d -зависимость энергии Ферми и эффективной массы в соответствующих структурах. Показано, что экспериментальное значение периода колебаний равно толщине КЯ, когда дно низшей подзоны совпадает с энергией Ферми. Такая толщина объяснялась как минимальная толщина КЯ, при которой квантово-размерные эффекты являются основным фактором, который определяет немонотонное поведение толстотных зависимостей термоэлектрических параметров соответствующих структур.

Также обнаружено и показано определяющее влияние геометрических параметров на ширину запрещенной зоны или перекрытия зон квантовой проволоки, сверхрешетки квантовых ям и стека квантовых точек.

[1] Dresselhaus M.S., Ghen G., Rang M.I., Yang R., Lee H., Wang D., Ren Z., Fleurial J-P., Gogna P. New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials // Adv. Mater. - 2007. - № 19. - P. 1043-1053.