

# Расчет подвижности и термоэлектрической эффективности многослойных структур с квантовыми ямами

© Д.А. Пшенай-Северин, Ю.И. Равич\*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

\* Санкт-Петербургский государственный технический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 13 декабря 2001 г. Принята к печати 10 января 2002 г.)

Произведен расчет термоэлектрической добротности многослойных структур с квантовыми ямами с учетом изменения времени релаксации носителей по сравнению с объемным образцом. Учитывались механизмы рассеяния на акустических фонах, близкоедействующем потенциале примесей и полярного рассеяния в приближении изотропного параболического закона дисперсии носителей. Используемая модель основана на предположении, что фонный спектр в сверхрешетке не отличается от объемного. Кроме того, рассеяние считается упругим и используется приближение времени релаксации для всех трех рассмотренных механизмов рассеяния. Сравнение с расчетом для объемного образца показало, что учет уменьшения времени релаксации в двумерном случае приводит к тому, что выражения для термоэлектрической добротности в обоих случаях совпадают и их величины оказываются равными, если химический потенциал в каждом из случаев выбирается из условия максимума добротности.

## 1. Введение

Интенсивные теоретические и экспериментальные исследования квантово-размерных структур, произведенные в последние десятилетия, привлекли внимание также и к возможности их использования для увеличения термоэлектрической эффективности  $Z$ . Исследования в этом направлении начались с работ Хикса и Дресслерхауза [1], которые показали путем расчета, что можно существенно, в 2–3 и более раз, увеличить  $Z$  путем приготовления термоэлектрического материала в форме многослойных структур с квантовыми ямами. Основной выигрыш в термоэлектрической эффективности достигался за счет увеличения плотности состояний носителей тока вблизи краев зон в двумерных системах по сравнению с трехмерными. При этом предполагалось, что размерное квантование не приводит к изменению подвижности носителей тока вдоль слоев. В работе [2] экспериментально исследовались слоистые структуры, состоящие из квантовых ям на основе  $PbTe$ , разделенных барьерами из  $Pb_{1-x}Eu_xTe$ . Подвижность носителей в квантовых ямах, так же как и в работе [1], считалась неизменной по сравнению с объемным образцом. Результаты измерений термоэдс  $\alpha$  и концентрации носителей  $n$  показали, что фактор  $\alpha^2 n$  растет с уменьшением толщины квантовых ям  $a$ . Из этого был сделан вывод о возможности увеличения  $Z$  в таких структурах.

Однако, как было отмечено в работах [3,4], тот же эффект увеличения плотности состояний, который обеспечивает повышение концентрации при данном химическом потенциале, приводит к неизбежному падению подвижности, что было подтверждено численным расчетом для конкретного полупроводника ( $PbTe$ ). В работе [4] был проведен численный расчет добротности и фактора  $\alpha^2 n$ . Зависимость  $\alpha^2 n$  от величины  $a$  согласуется

с экспериментальными данными из работы [2]. В то же время численный расчет добротности в работе [4] показал, что соответствующего роста  $Z$  с уменьшением толщины ям не наблюдается. Это говорит о необходимости с осторожностью делать выводы о росте добротности на основании данных о факторе  $\alpha^2 n$  из-за изменения подвижности носителей в таких структурах.

Поэтому представляется полезным рассмотреть вновь проблему термоэлектрической эффективности многослойных структур с учетом уменьшения подвижности в простейшей и в то же время реалистичной модели, позволяющей произвести расчет в аналитической форме при произвольных параметрах полупроводника. Используемая модель основана на допущении, что фонный спектр не изменяется существенным образом при переходе к многослойной структуре, т.е. фононы остаются объемными. Кроме того, температура считается достаточно высокой по сравнению с температурой Дебая, так что рассеяние на акустических и оптических фонах упругое, как и на примесных центрах, и во всех рассмотренных случаях можно пользоваться приближением времени релаксации. Мы рассмотрим рассеяние носителей тока на акустических колебаниях, полярное рассеяние на оптических фонах и рассеяние на близкоедействующем потенциале примесных атомов в приближении стандартного (изотропного параболического) закона дисперсии носителей.

Основана цель расчета заключается в выяснении вопроса — может ли в принципе изменение плотности электронных состояний при размерном квантовании приводить к увеличению термоэлектрической эффективности.

## 2. Время релаксации при рассеянии на акустических фононах

В случае достаточно узкого слоя, представляющего собой квантовую яму для электронов, все электроны находятся вблизи дна нижней подзоны размерного квантования. Если потенциальные барьеры достаточно высоки, то волновая функция электрона может быть записана в виде

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi a}{z}\right) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\boldsymbol{\rho}}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{k}_{\parallel}$  — волновой вектор электрона в плоскости ямы, координата  $\mathbf{r}$  имеет составляющие:  $\boldsymbol{\rho}$  — в плоскости ямы и  $z$  — в направлении, перпендикулярном плоскости;  $a$  — толщина, а  $S$  — площадь слоя. В соответствии с методом деформационного потенциала потенциальная энергия взаимодействия электрона с акустическими колебаниями имеет вид [5]

$$U(\mathbf{r}) = \varepsilon_1 \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{i\varepsilon_1}{\sqrt{NM_0}} \sum_{\mathbf{q}} q [a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}], \quad (2)$$

где  $\varepsilon_1$  — константа деформационного потенциала,  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  — смещение точки  $\mathbf{r}$  кристалла, описывающее акустические колебания решетки в континуальном приближении,  $N$  — число элементарных ячеек в объеме кристалла,  $M_0$  — масса элементарной ячейки,  $\mathbf{q}$  — волновой вектор фонона, а  $a_{\mathbf{q}}$  — комплексные нормальные координаты. Фононы при этом считаются не подверженными влиянию неоднородностей, вызывающих появление квантовых ям для электронов, т.е. это обычные фононы в трехмерном кристалле объемом  $V = Sa$ . Тогда, используя (1) и (2), для матричного элемента перехода электрона между состояниями с волновыми векторами  $\mathbf{k}_{\parallel}$  и  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  в нижней подзоне размерного квантования с участием акустического фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  получим

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} = \int_V d^3r [\Psi_{\mathbf{k}'_{\parallel}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r})]. \quad (3)$$

После интегрирования матричный элемент имеет вид

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel} \pm \mathbf{q}_{\parallel}} = M Y^{\pm}(q_z), \quad (4)$$

где знаки (+) и (–) соответствуют переходу электрона в состояние  $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}$  с поглощением фонона и в состояние  $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}$  с испусканием фонона соответственно. Множитель  $M$  равен обычному матричному элементу, возникающему в теории деформационного потенциала в трехмерном случае, а функция  $Y^{\pm}(q_z)$  — результат интегрирования по переменной  $z$ :

$$Y^{\pm}(q_z) = \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) e^{\pm i q_z z} dx = \frac{e^{\pm i \pi x} \sin \pi x}{\pi x (1 - x^2)}, \quad (5)$$

где введено обозначение

$$x = \frac{a}{2\pi} q_z. \quad (6)$$

Матричный элемент  $M$  не зависит от волнового вектора фонона  $\mathbf{q}$  и имеет вид

$$M = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2 k_0 T}{2NM_0 v_0^2}}, \quad (7)$$

где  $k_0$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура, а  $v_0$  — скорость звука. Тогда обратное время релаксации в двумерном (2D) случае дается выражением

$$\tau_{2D}^{-1} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |M|^2 \frac{q_{\chi}}{k_{\chi}} [ |Y^+(q_z)|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - \varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})) - |Y^-(q_z)|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}) - \varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})) ], \quad (8)$$

в котором  $\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})$  — энергия электрона с волновым вектором  $\mathbf{k}_{\parallel}$ ,  $q_{\chi}$  и  $k_{\chi}$  — проекции волновых векторов фонона и электрона на вектор  $\boldsymbol{\chi}$ , определяющий направление обобщенной силы (вектора электрического поля или градиента температуры).

Переходя в (8) от суммирования к интегрированию и проводя последнее, получим

$$\tau_{2D}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 V g_{2D} X, \quad (9)$$

где  $g_{2D} = m^*/(2\pi\hbar^2)$  — двумерная плотность электронных состояний,  $m^*$  — эффективная масса электрона, а  $X$  — величина, получающаяся из (5) интегрированием по  $q_z$ :

$$X = \int_{-\infty}^{\infty} |Y^{\pm}(q_z)|^2 \frac{dq_z}{2\pi} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\sin \pi x}{\pi x (1 - x^2)} \right)^2 dx = \frac{3}{2} a^{-1}. \quad (10)$$

Полученное выражение для  $\tau_{2D}$  совпадает с имеющимся в литературе [6–8]. Его нужно сравнить с соответствующим временем релаксации для трехмерного (3D) кристалла:

$$\tau_{3D}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 V g_{3D}, \quad (11)$$

$$g_{3D} = \frac{m^* k}{2\pi^2 \hbar^3}. \quad (12)$$

Сравнение показывает, что в размерно-квантованном слое время релаксации для рассеяния на акустических фононах, пропорциональное малой толщине  $a$ , существенно меньше, чем в объемном кристалле:

$$\frac{\tau_{2D}}{\tau_{3D}} = \frac{2ka}{3\pi}. \quad (13)$$

Далее, после получения аналогичных результатов для двух других механизмов рассеяния, будет показано, что фактор (13) полностью компенсирует изменение кинетических коэффициентов и термоэлектрической эффективности, происходящие за счет модификации вида функции плотности состояний при размерном квантовании.

### 3. Время релаксации при рассеянии на близкодействующем потенциале примесей и дефектов

Изменение плотности состояний благодаря размерному квантованию приводит к увеличению концентрации носителей тока при данном химическом потенциале, что требует повышения концентрации электрически активной примеси. Мы будем считать, что примесные атомы расположены в проводящих слоях, эффективно рассеивая носители тока. Хотя существует способ уменьшения рассеяния на примесях путем легирования барьеров между квантовыми ямами [9], так что носители и примеси оказываются пространственно разделенными, конкретная реализация того или иного механизма рассеяния имеет для нас второстепенное значение, поскольку главная цель работы заключается в решении вопроса о влиянии модификации плотности состояний на явления переноса при различных механизмах рассеяния.

Во многих термоэлектрических материалах, например РbTe [10], кулоновский потенциал ионизированных примесей и точечных дефектов с точки зрения рассеяния малоэффективен, и рассеяние происходит главным образом на внутренней части потенциала примесных атомов. Можно предположить, что близкодействующий потенциал  $U(\mathbf{r})$  имеет радиус действия  $r_0$  порядка межатомных расстояний.

Для вычисления матричного элемента взаимодействия электрона с примесным центром в трехмерном образце объема  $V$  используем блоховскую функцию

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (14)$$

Матричный элемент перехода электрона из состояния с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в состояние с волновым вектором  $\mathbf{k}'$  при рассеянии на близкодействующем потенциале примесного атома, центр которого расположен в точке  $\mathbf{r}_i$ , будет иметь вид

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{V} \int d^3r [e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})]. \quad (15)$$

Сделав замену переменной  $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{r}_i$  и воспользовавшись свойством периодичности блоховской амплитуды  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$ , получим

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{e^{-i\mathbf{r}_i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}}{V} \int_V d^3r' [e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')]. \quad (16)$$

Поскольку близкодействующий потенциал отличен от нуля только в малой области  $\Omega_0 \sim r_0^3$  вблизи примесного атома, область интегрирования в (16) можно заменить на  $\Omega_0$ . Тогда для всех  $r' \leq r_0$ , поскольку  $r_0$  имеет величину порядка постоянной решетки, для рассеяния носителей с малым  $k$  будем иметь  $kr' \ll 1$ . Тогда экспоненты, стоящие под интегралом в (16), близки к единице. Кроме того, при малых  $k$  закон дисперсии электронов слабо отклоняется от параболического, поэтому в том же приближении можно считать, что блоховские амплитуды  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  слабо зависят от  $\mathbf{k}$  и равны  $u_0(\mathbf{r})$ . Учитывая это, имеем

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{e^{-i\mathbf{r}_i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}}{V} C, \quad (17)$$

где не зависящая от волновых векторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  величина  $C$  равна

$$C = \int_{\Omega_0} u_0^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') u_0(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (18)$$

Таким образом, квадрат матричного элемента, как и в случае акустического рассеяния, не зависит от волновых векторов электрона и равен

$$|M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 = \frac{|C|^2}{V^2}. \quad (19)$$

Обратное время релаксации для объемного образца при рассеянии на единичной примеси будет иметь вид (11), где необходимо заменить  $|M|^2$  на величину  $|C|^2/V^2$ . При независимом рассеянии на примесных атомах, равномерно распределенных по объему образца  $V$ , время релаксации для рассеяния на одной примеси должно быть домножено на их число  $N_I$ :

$$\tau_{3D}^{-1} = N_I \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 V g_{3D} = \frac{2\pi}{\hbar} |C|^2 n_I g_{3D}, \quad (20)$$

где  $n_I = N_I/V$  — концентрация примесей, а  $g_{3D}$ , как и раньше, определяется формулой (12).

Волновая функция электрона в квантовой яме с учетом блоховского множителя имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} z\right) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\rho} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (21)$$

Матричный элемент перехода для рассеяния на примесном атоме, находящемся в узле решетки  $\mathbf{r}_i$  в пределах квантовой ямы, равен

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} = \frac{2}{V} \int_S d^3\rho \int_0^a dz \left[ e^{-i\mathbf{k}'_{\parallel}\rho} \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \times u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\rho} \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right]. \quad (22)$$

Проводя вычисления по аналогии с рассмотренным выше случаем трехмерного образца в том же приближении малых волновых векторов электрона, для квадрата модуля матричного элемента получим

$$|M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}}|^2 = \frac{4|C|^2}{V^2} \sin^4\left(\frac{\pi}{a} z_i\right), \quad (23)$$

где  $z_i$  — составляющая координаты примесного атома  $\mathbf{r}_i$  вдоль оси  $z$ .

Обратное время релаксации носителей в квантовой яме можно найти, используя (23), по формуле

$$\tau_{2D}^{-1} = -\frac{2\pi}{\hbar} \int_V d^3 r_i \left\{ n_I \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \left[ |M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}}|^2 \frac{k'_{\chi} - k_{\chi}}{k_{\chi}} \times \delta(\varepsilon(\mathbf{k}'_{\parallel}) - \varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})) \right] \right\}, \quad (24)$$

где вектор  $\chi$  и  $\varepsilon(\mathbf{k}_{\parallel})$  имеют тот же смысл, что и в (8), а  $n_I$  — объемная концентрация примесных атомов.

Поскольку зависимость  $\tau_{2D}$  от координаты примесного атома входит в (24) только через матричный элемент (23), то, при равномерном распределении независимых рассеивающих центров по объему квантовой ямы, интегрирование по координатам примесных атомов даст вклад в обратное время релаксации в виде множителя, равного

$$\int_V d^3 r_i \left( n_I \sin^4\left(\frac{\pi}{a} z_i\right) \right) = n_I S \int_0^a \sin^4\left(\frac{\pi}{a} z_i\right) dz_i = \frac{3}{8} n_I V. \quad (25)$$

В результате, проведя суммирование в (24) по  $\mathbf{k}'_{\parallel}$ , получим

$$\tau_{2D}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |C|^2 n_I g_{2D} \frac{3}{2} a^{-1}. \quad (26)$$

Сравнение времен релаксации для рассеяния на близкодействующем потенциале в объемном образце (20) и в слоистом образце с квантовыми ямами (26) снова дает формулу (13), т.е. отношение времен релаксации  $\tau_{2D}$  и  $\tau_{3D}$  для рассеяния на акустических фононах и близкодействующем потенциале примесей имеет одинаковый вид.

#### 4. Время релаксации в случае полярного рассеяния на оптических фононах

В обоих рассмотренных выше случаях матричный элемент в объемном образце не зависел от волновых векторов электрона и фонона, поэтому интересно исследовать вопрос — не является ли полученное равенство (13) для отношения  $\tau_{2D}/\tau_{3D}$  следствием особого вида матричного элемента, и рассмотреть случай полярного рассеяния,

для которого матричный элемент обратно пропорционален волновому вектору оптического фонона.

Полярные оптические фононы более чувствительны к неоднородностям, возникающим в слоистой структуре с квантовыми ямами. Расчеты спектров оптических фононов, учитывающие пространственное квантование фононов, производились в ряде работ (см., например, обзор [11] и список литературы в нем). Сравнение различных моделей в случае рассеяния носителей в квантово-размерных структурах на оптических фононах показало [12–15], что различия в результатах, полученных с использованием оптических фононных спектров объемного типа и с использованием спектров, рассчитанных в соответствии с более точными моделями, не слишком велики. В соответствии с этим будем рассматривать рассеяние электронов в слоистой структуре с квантовыми ямами на объемных оптических фононах в континуальном приближении.

В этом приближении потенциал взаимодействия электронов с полярными оптическими колебаниями имеет вид [5]

$$U(\mathbf{r}) = i \sqrt{\frac{4\pi e^2 \omega_l^2}{V \varepsilon^*}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q} [a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}], \quad (27)$$

где  $\omega_l$  — предельная частота продольных оптических колебаний,

$$(\varepsilon^*)^{-1} = \varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1},$$

$\varepsilon_{\infty}$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические постоянные.

Матричный элемент рассеяния на оптических фононах, учитывающий изменение числа фононов с волновым вектором  $\mathbf{q}$  от величины  $N_{\mathbf{q}}$  до  $N'_{\mathbf{q}}$ , имеет вид

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} = \langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}'_{\parallel} | U(\mathbf{r}) | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}_{\parallel} \rangle. \quad (28)$$

Используя волновую функцию электронов в виде (1), получим

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} &= i \sqrt{\frac{4\pi e^2 \omega_l^2}{V \varepsilon^*}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q} \left[ \langle N'(\mathbf{q}) | a_{\mathbf{q}} | N(\mathbf{q}) \rangle Y^+(q_z) \right. \\ &\times \frac{1}{S} \int_S e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel})\rho} d^2 \rho - \langle N'(\mathbf{q}) | a_{\mathbf{q}}^* | N(\mathbf{q}) \rangle Y^-(q_z) \\ &\times \left. \frac{1}{S} \int_S e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel})\rho} d^2 \rho \right], \quad (29) \end{aligned}$$

где функции  $Y^{\pm}(q_z)$ , как и раньше, определяются формулой (5); интегрирование по координате  $\rho$  дает дельта-функции, выражающие закон сохранения квазиимпульса в плоскости слоев, а матричные элементы от  $a_{\mathbf{q}}$  и  $a_{\mathbf{q}}^*$ ,

связанные с поглощением и испусканием фонона, отличны от нуля и равны соответственно

$$\langle N'(\mathbf{q})|a_{\mathbf{q}}|N(\mathbf{q})\rangle = \sqrt{\hbar N_{\mathbf{q}}/2\omega_l} \text{ при } N'_{\mathbf{q}} = N_{\mathbf{q}} - 1$$

и

$$\langle N'(\mathbf{q})|a_{\mathbf{q}}^*|N(\mathbf{q})\rangle = \sqrt{\hbar(N_{\mathbf{q}} + 1)/2\omega_l} \text{ при } N'_{\mathbf{q}} = N_{\mathbf{q}} + 1.$$

В результате для матричного элемента получим

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}_{\parallel}\pm\mathbf{q}_{\parallel}} = M^{\pm}(q)Y^{\pm}(q_z), \quad (30)$$

где  $M^{\pm}(q)$  — хорошо известный матричный элемент для полярного рассеяния в трехмерном случае, равный

$$M^{\pm}(q) = \pm i \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_l}{V \varepsilon^*}} \frac{1}{q} \begin{cases} \sqrt{N_{\mathbf{q}}}, \\ \sqrt{N_{\mathbf{q}} + 1}, \end{cases} \quad (31)$$

где знак  $+(-)$  и верхняя (нижняя) строка соответствуют поглощению (испусканию) фонона. При температурах  $k_0T \gg \hbar\omega_l$  число фононов составляет  $N_{\mathbf{q}} = k_0T/\hbar\omega_l \gg 1$ , поэтому для квадрата модуля объемного матричного элемента можно записать

$$|M^{\pm}(q)|^2 = |M(q)|^2 = \frac{2\pi e^2 k_0T}{V \varepsilon^*} \frac{1}{q^2}. \quad (32)$$

Выражение для обратного времени релаксации записывается аналогично (8), где вместо  $|M|^2$  необходимо использовать  $|M(q)|^2$  из (32). Вычисление  $\tau_{2D}^{-1}$  выполняется сложнее, чем в случае акустического рассеяния, так как интегрирование по компонентам  $\mathbf{q}_{\parallel}$  и  $q_z$  волнового вектора фонона в (8) не удастся разделить из-за того, что в квадрат матричного элемента (32) входит  $q^2 = q_{\parallel}^2 + q_z^2$ . Однако, интегрируя сначала по направлению и модулю вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$  в плоскости слоев, а затем по  $q_z$ , удастся привести вычисления в аналитической форме. В результате была получена формула

$$\tau_{2D}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k)|^2 V g_{2D} \frac{3}{2} a^{-1}, \quad (33)$$

где выражение для  $|M(k)|^2$  задается формулой (32).

Время релаксации для полярного рассеяния в трехмерном образце имеет вид [5]

$$\tau_{3D}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k)|^2 V g_{3D}. \quad (34)$$

Сравнение (33) и (34) снова дает формулу (13). Таким образом, в рамках использования приближений расчеты показали, что в случаях акустического рассеяния, рассеяния на близкодействующем потенциале и полярного рассеяния отношения времен релаксации в двумерном и трехмерном случаях одинаковы (13), и  $\tau_{2D}$  уменьшается пропорционально малой толщине квантово-размерного слоя  $a$ .

## 5. Термоэлектрическая добротность

Пользуясь полученными выражениями для времен релаксации  $\tau_{2D}$  (9), (26) и (33), можно вычислить электропроводность  $\sigma_{2D}$  многослойной системы, состоящей из квантовых ям и барьеров между ними. В выражении, полученном без учета изменения времени релаксации при размерном квантовании [1], проводимость  $\sigma_{2D}$ , в частности, обратно пропорциональна  $a$ , что является главной причиной повышения термоэлектрической эффективности. В нашем расчете присутствие параметра  $a$  в формулах для  $\tau_{2D}$  компенсирует этот эффект. Более того, выражения для  $\sigma_{2D}$  в точности совпадают с выражениями для электропроводности массивного образца  $\sigma_{3D}$  для каждого из рассмотренных выше механизмов рассеяния.

Действительно, выражение для электропроводности объемного образца может быть записано в виде

$$\sigma_{3D} = \frac{4e^2}{3m^*} \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{3D} g_{3D} \varepsilon d\varepsilon, \quad (35)$$

где  $f_0$  — равновесная функция распределения Ферми–Дирака. Поскольку выражения для обратного времени релаксации для всех трех механизмов рассеяния имеют похожий вид (11), (20), (34), а именно пропорциональны квадрату матричного элемента и плотности состояний  $g_{3D}$ , то, подставляя в (35) время релаксации, например, в виде (11), получим

$$\sigma_{3D} = \frac{2e^2 \hbar}{3\pi m^*} \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\varepsilon}{|M|^2 V} d\varepsilon. \quad (36)$$

В двумерном случае для удельной электропроводности многослойной системы можно записать

$$\sigma_{2D} = \frac{2e^2}{m^*} \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau_{2D} \frac{g_{2D}}{a} \varepsilon d\varepsilon. \quad (37)$$

Тогда после подстановки в (37) выражения для времени релаксации  $\tau_{2D}$  в виде (9) получим выражение для  $\sigma_{2D}$ , в точности совпадающее с (36).

Выражения для термоэдс и электронной теплопроводности (числа Лоренца) многослойной системы также совпадают с соответствующими величинами для объемного образца.

Для дальнейшего изложения удобно переписать времена релаксации в объемном образце и в слоистой структуре с квантовыми ямами в следующем виде:

$$\tau_{3D} = \tau_0 \left( \frac{\varepsilon}{k_0T} \right)^r, \quad (38)$$

$$\tau_{2D} = a \frac{2\sqrt{2m^*k_0T}}{3\pi\hbar} \tau_0 \left( \frac{\varepsilon}{k_0T} \right)^{r+\frac{1}{2}}, \quad (39)$$

в которых  $r$  — параметр рассеяния для объемного образца, а  $\tau_0$  — не зависящая от энергии электрона константа.

Различия в параметрах рассеяния в трехмерном ( $r$ ) и двумерном ( $r + 1/2$ ) случаях возникают из-за разной энергетической зависимости плотности состояний. Величины параметров  $r$  и  $\tau_0$  для рассмотренных типов рассеяния имеют вид: для акустического рассеяния

$$r = -\frac{1}{2}, \quad \tau_0 = \frac{2\pi\hbar^4 M_0 N v_0^2}{\varepsilon_1^2 V (2m^* k_0 T)^{3/2}}, \quad (40)$$

для рассеяния на близкодествующем потенциале

$$r = -\frac{1}{2}, \quad \tau_0 = \frac{\pi\hbar^4}{|C|^2 n_l m^* \sqrt{2m^* k_0 T}}, \quad (41)$$

для полярного рассеяния

$$r = \frac{1}{2}, \quad \tau_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{e^2 \sqrt{2m^* k_0 T}}. \quad (42)$$

В случае степенной зависимости времен релаксации вида (38), (39) с параметрами  $\tau_0$  и  $r$  из (40)–(42) можно получить выражения: для электропроводности

$$\sigma = \frac{2^{3/2} e^2 (m^*)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \tau_0 \left( r + \frac{3}{2} \right) F_{r+1/2}(\xi^*), \quad (43)$$

для термоэдс

$$\alpha = -\frac{k_0}{e} \left( \frac{r + 5/2}{r + 3/2} \frac{F_{r+3/2}(\xi^*)}{F_{r+1/2}(\xi^*)} - \xi^* \right), \quad (44)$$

для электронной теплопроводности

$$\kappa = \frac{2^{3/2} (m^*)^{1/2} (k_0 T)^{5/2} k_0}{3\pi^2 \hbar^3} \tau_0 \times \left( (r + 7/2) F_{r+5/2}(\xi^*) - \frac{(r + 5/2)^2}{r + 3/2} \frac{F_{r+3/2}^2(\xi^*)}{F_{r+1/2}(\xi^*)} \right), \quad (45)$$

в которых  $\xi^* = \xi/k_0 T$ , где  $\xi$  — химический потенциал, а  $F_\nu(\xi^*)$  — интеграл Ферми порядка  $\nu$ .

Эти выражения оказываются справедливыми как для случая слоистой системы с квантовыми ямами, так и для трехмерного случая, если в качестве  $\xi^*$  брать соответствующие химические потенциалы, причем в двумерном случае за нуль отсчета энергии берется дно первой подзоны размерного квантования.

Таким образом, если считать фононную теплопроводность  $\kappa_{ph}$  неизменной по сравнению с объемным образцом, то выражения для добротности  $Z = \alpha^2 \sigma / (\kappa + \kappa_{ph})$ , которые можно получить с использованием (44)–(45), в двумерном и трехмерном случаях будут иметь одинаковый вид:

$$ZT = \frac{\left[ \left( r + \frac{5}{2} \right) F_{r+3/2}(\xi^*) - \xi^* \left( r + \frac{3}{2} \right) F_{r+1/2}(\xi^*) \right]^2}{A + B}, \quad (46)$$

где слагаемые  $A$  и  $B$  в знаменателе равны

$$A = \frac{3\pi^2 \hbar^3 (r + \frac{3}{2}) F_{r+1/2}(\xi^*) \kappa_{ph}}{2^{3/2} (m^*)^{1/2} k_0 (k_0 T)^{5/2} \tau_0},$$

$$B = \left( r + \frac{7}{2} \right) \left( r + \frac{3}{2} \right) F_{r+5/2}(\xi^*) F_{r+1/2}(\xi^*) - \left( r + \frac{5}{2} \right)^2 F_{r+3/2}^2(\xi^*).$$

Если теперь в обоих случаях выбрать химический потенциал из условия обеспечения максимальной добротности, то оптимальный химический потенциал  $\xi^*$  и максимальное значение  $Z$  для объемного образца и структуры с квантовыми ямами будут равны, хотя максимальные  $Z$  в двумерном случае будут достигаться при более высоких концентрациях носителей и более низких подвижностях.

## 6. Заключение

Таким образом, расчет добротности, учитывающий изменение времени релаксации в двумерных системах по сравнению с трехмерными показал, что идея о возможности повышения термоэлектрической эффективности в форме, представленной Хиксом и Дрессельхауз [1], лишена основания. Требуются дополнительные, существенно иные соображения, чтобы сохранить такую возможность.

Такие соображения были высказаны, в частности, в работе [16]. Оказывается, благодаря размерному квантованию неупругость рассеяния проявляется при больших температурах, чем в трехмерном случае. Кроме того, эффекты увлечения могут также оказаться существенными в многослойных структурах.

К факторам, положительно влияющим на величину  $Z$  в двумерных системах, можно отнести и пространственное квантование фононов. Несмотря на то что отличие фононных мод от объемных не приводит к сильному изменению рассеяния носителей в квантово-размерных структурах, оно может привести к уменьшению фононной теплопроводности, что в свою очередь приведет к увеличению  $Z$  [17].

Существует, однако, ряд факторов, отрицательно влияющих на термоэлектрическую добротность двумерных структур. Так, например, известно [6], что туннелирование электронов через барьеры, разделяющие квантовые ямы, уменьшает термоэлектрическую эффективность, как и теплопроводность по слоям, играющим роль барьеров. Кроме того, некоторые механизмы рассеяния носителей тока, невозможные в массивных образцах, могут приводить к более сильному рассеянию в двумерной системе. Одним из механизмов рассеяния, специфических для тонких слоев, является кулоновское рассеяние носителей в квантовых ямах на заряженных примесных центрах, расположенных в барьерных слоях [18].

Нам хотелось бы обратить внимание на другой специфический механизм рассеяния, существующий в слоях толщиной, не сильно превышающей постоянную решетки. При малой толщине слоя неизбежны флуктуации толщины  $\Delta a$ , приводящие к изменению энергии носителей при  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ . Энергия, соответствующая дну первой (нижней) подзоны, равна  $\varepsilon_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2m^* a^2)$ . При увеличении толщины слоя на  $\Delta a$  понижение этой энергии составляет

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left[ \frac{1}{(a + \Delta a)^2} - \frac{1}{a^2} \right] \\ &= -\frac{\hbar^2 \pi^2}{m^* a^2} \frac{\Delta a}{a} \frac{1 + \Delta a / 2a}{(1 + \Delta a / a)^2}. \end{aligned} \quad (47)$$

Изменение энергии  $\Delta\varepsilon$  играет роль рассеивающего потенциала для носителей тока. Влияние обсуждаемого механизма рассеяния на подвижность зависит от пространственного масштаба флуктуаций и числа областей изменения толщины. Если это влияние велико, то оно приводит к усилению рассеяния и уменьшению термоэлектрической добротности.

Работа поддержана программой „Интеграция“, проект № 75.

## Список литературы

- [1] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B, **47**, 12 727 (1993).
- [2] L.D. Hicks, T.C. Harman, X. Sun, M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B, **53**, 10 493 (1996).
- [3] T.L. Reinecke, D.A. Broido. Proc. Mater. Res. Soc. Symp., **487**, 161 (1997).
- [4] D.A. Broido, T.L. Reinecke. Appl. Phys. Lett., **70**, 2834 (1997).
- [5] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978).
- [6] В.К. Ridley. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **15**, 5899 (1982).
- [7] Б.А. Тавгер, В.Я. Демиховский. УФН, **96**, 61 (1968).
- [8] А.Я. Шик. ФТП, **7**, 261 (1973).
- [9] H.L. Stormer, A.C. Gossard, W. Wiegmann et al. Appl. Phys. Lett., **39**, 912 (1982).
- [10] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe и PbS* (М., Наука, 1968). [Пер. на англ.: Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, I.A. Smirnov. *Semiconducting Lead Chalcogenides.*, ed. L.S. Stil'bans (Plenum Press, N.Y.-London, 1970)].
- [11] В.К. Ridley. Rep. Prog. Phys., **54**, 169 (1991).
- [12] H. Rucker, E. Molinary, P. Lugli, Phys. Rev. B, **44**, 3463 (1991).
- [13] H. Rucker, E. Molinary, P. Lugli. Phys. Rev. B, **45**, 6747 (1992).
- [14] N.A. Zakhleniuk, C.R. Bennett, N.C. Constantinov, B.K. Ridley, M. Babiker. Phys. Rev. B, **54**, 17 838 (1996).
- [15] N. Nishiguchi. Phys. Rev. B, **54**, 1494 (1996).
- [16] Ю.И. Иванов, М.В. Ведерников, Ю.И. Равич. Письма ЖЭТФ, **69**, 290 (1999). [JETP Lett., **69**, 317 (1999)].

- [17] A. Balandin. Phys. Low-Dim. Structur. **1/2**, 1 (2000).
- [18] K. Hess. Appl. Phys. Lett., **35**, 484 (1979).

Редактор Т.А. Полянская

## Calculation of mobility and thermoelectric figure of merit of multiple-quantum-well structures

D.A. Pshenay-Severin, Yu.I. Ravich\*

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

\* St. Petersburg State Technical University,  
195251 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The mobility and the thermoelectric figure of merit of multiple-quantum-well structures (MQW) have been calculated taking into account the decrease of the carrier relaxation time in MQW structures in comparison with the bulk case. Calculations have been made for cases of the carrier scattering by acoustic phonons, short-range impurity potential and polar optical scattering in the standard dispersion law approximation. The model is based on the supposition that the phonon spectrum in MQW structures does not differ from that in the bulk case. The scattering is supposed to be elastic and the relaxation time approximation is used for all three scattering mechanisms. The comparison with the bulk case has shown that the expression for the thermoelectric figure of merit in MQW structures is exactly the same as in the bulk case because of the carrier relaxation time decrease. Magnitudes of the figures of merit turn out to be equal if the chemical potentials are taken to optimize these quantities.