

Термоэлектрические свойства симметричных и асимметричных структур с двойными квантовыми ямами

© И.В. Сур[†]

Технический университет Молдовы,
MD 2001 Кишинев, Молдова

(Получена 4 сентября 2008 г. Принята к печати 4 сентября 2008 г.)

Проведен анализ состояний и транспорта носителей заряда в ориентированных в плоскости (100) двойных квантовых ямах $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Исследованы зависимости подвижности и коэффициента Зеебека от толщины внутреннего барьера в симметричных и асимметричных структурах. Показано, что при больших расстояниях между ямами даже слабое нарушение симметрии структуры и, как следствие, существенная перестройка волновых функций подавляют межподзонное рассеяние с переходом носителей между ямами и обеспечивают в кинетических коэффициентах правильный предельный переход к изолированным ямам. Найдены некоторые возможности увеличения термоэлектрического фактора мощности и подходящий набор параметров структуры, рассчитанных на основе нашей модели.

PACS: 72.20.Pa, 73.63.Hs

1. Введение

Интерес к исследованию термоэлектрических свойств двумерных структур возрос после появления работ [1–4], в которых теоретически и экспериментально была показана возможность увеличения термоэлектрической добротности вследствие увеличения плотности состояний в системах пониженной размерности. Были рассмотрены различные подходы к этой проблеме и различные структуры [5–17]. Экспериментальное и теоретическое исследование структур с двойными квантовыми ямами на основе $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ показало [18–21], что вследствие модуляции волновой функции подвижность в таких системах может быть выше, чем в изолированной квантовой яме (КЯ). Такое поведение подвижности очень привлекательно для термоэлектрических применений. Однако увеличение проводимости обычно сопровождается уменьшением коэффициента Зеебека [5]. Поэтому необходимы расчеты кинетических коэффициентов в конкретных структурах.

В данной работе рассчитаны подвижность электронов, коэффициент Зеебека и термоэлектрический фактор мощности структур с двойными квантовыми ямами на основе $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Найдено, что подходящий набор параметров структуры обеспечивает увеличение не только подвижности, но и фактора мощности. Исследовано влияние асимметрии между ямами на электронные состояния и кинетические коэффициенты. Как будет показано далее, даже малое нарушение симметрии структуры подавляет межподзонное рассеяние с переходом носителей между ямами и, как результат, существенно изменяет все кинетические коэффициенты в структурах с большим расстоянием между ямами.

2. Электронные состояния

Рассмотрим две квантовые ямы, появляющиеся в тонких слоях PbTe с толщинами d_1 и d_2 , барьерами для

которых служат слои $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Для описания электронных состояний в одной из долин был использован гамильтониан [22], учитывающий в простейшем приближении непараболичность закона дисперсии носителей заряда,

$$H = -\frac{\hbar}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{m(z, E)} \right)_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} + U(z),$$

$$x_i = (x, y, z). \quad (1)$$

Здесь оси координат x, y выбраны в плоскости, а z перпендикулярно плоскостям ям; $U(z)$ — потенциал прямоугольной КЯ: $U(z) = 0$, если $-(d_1 + b/2) < z < -b/2$ или $b/2 < z < b/2 + d_2$, и $U(z) = U$, если $z < -(d_1 + b/2)$, $z > d_2 + b/2$ или $-b/2 < z < b/2$; начало отсчета энергии выбрано на дне зоны проводимости PbTe , b — толщина внутреннего барьера. Компоненты m_{ij}^{-1} тензора обратных эффективных масс зависят от z и принимают их значения в барьерах и ямах. В системе координат, связанной с главными осями ν -го эллипсоида постоянной энергии, тензор m_{ij}^{-1} диагонален, и его компоненты приведены в [22]. Решая уравнение Шредингера во всех пяти областях структуры и используя граничные условия Бастарда, можно получить

$$\frac{\sin(pd_1)}{\sin(pd_1 + 2\delta)} e^{-\kappa b} = \left[\frac{\sin(pd_2)}{\sin(pd_2 + 2\delta)} e^{-\kappa b} \right]^{-1}, \quad (2)$$

где

$$p(E, \mathbf{k}) = \left\{ \frac{2m_z^W(E)}{\hbar^2} [E - \varepsilon^W(\mathbf{k})] \right\}^{1/2},$$

$$\kappa = \left\{ \frac{2m_z^B(E)}{\hbar^2} [U - E + \varepsilon^B(\mathbf{k})] \right\}^{1/2}, \quad \delta = \arctg \left[\frac{pm_z^B(E)}{\kappa m_z^W(E)} \right].$$

[†] E-mail: i.v.sur@mail.ru

Здесь $m_z^{W,B}(E)$ — z -компонента [23] эффективной массы электронов в ямах и барьерах,

$$\varepsilon^{W,B}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^{W,B}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^{W,B}}$$

имеет структуру кинетической энергии электронов, в которой массы зависят от полной энергии E , \mathbf{k} — двумерный волновой вектор электронов, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$; индексы W, B относятся к яме и барьеру соответственно.

Решения уравнения (2) дают закон дисперсии электронов в α -й подзоне: $E_{k\alpha} = E_\alpha + \varepsilon_{k\alpha}$, где E_α — энергия уровня размерного квантования, $\varepsilon_{k\alpha}$ — кинетическая энергия. Они были найдены численно. Использовался следующий набор параметров материалов [9,24–26]: $m_{\parallel}^W = 0.35m_0$, $m_{\perp}^W = 0.034m_0$, $E_g^W = 324$ мэВ для материала КЯ и $m_{\parallel}^B = 0.495m_0$, $m_{\perp}^B = 0.049m_0$, $E_g^B = 635$ мэВ ($U = 173$ мэВ, $x = 0.09$) для материала барьеров при температуре $T = 300$ К ($E_g^{W,B}$ — ширины запрещенной зоны в ямах и барьерах, $m_{\parallel}^{W,B}$, $m_{\perp}^{W,B}$ — продольные и поперечные эффективные массы). Рассмотрен простейший случай ориентированных в плоскости (100) КЯ, когда все долины объемных материалов имеют эквивалентное расположение относительно плоскости ям и соответственно размерное квантование не снимает вырождение подзон.

Непараболичность зон проводимости исходных материалов уменьшает энергии уровней размерного квантования и существенно изменяет закон дисперсии $\varepsilon_{k\alpha}$. Численное исследование уравнения (2) показало, что, как и в изолированной яме [15], $\varepsilon_{k\alpha}$ можно аппроксимировать с хорошей точностью кейновским законом дисперсии,

$$\varepsilon_{k\alpha} = (E_{g\alpha}/2) \left\{ [1 + 4\eta_{k\alpha}/E_{g\alpha}]^{1/2} - 1 \right\}, \quad (3)$$

$$\eta_{k\alpha} = \hbar^2 k_x^2 / m_{x\alpha} + \hbar^2 k_y^2 / 2m_{y\alpha},$$

где $E_{g\alpha} = E_g^W + E_\alpha$. Наличие второй ямы сказывается главным образом на величинах эффективных масс $m_{x\alpha}$ и $m_{y\alpha}$, которые теперь зависят от параметров ям, параметров внутреннего и внешних барьеров и от энергии размерного квантования вследствие учета непараболичности и проникновения волновой функции в барьеры. Значения этих масс находились численно из (2).

На рис. 1 показаны зависимости энергий уровней E_α и энергии Ферми E_F в единицах k_0T (k_0 — постоянная Больцмана) от толщины b внутреннего барьера в симметричной структуре с толщинами ям $d_1 = d_2 = 20$ Å. С увеличением b энергия первого уровня возрастает (кривая 1). При $b = b^*$, где $b^* = 2m_z^W(U) \operatorname{ctg}(p_0 d) / p_0 m_z^B(U)$, $p_0 = p(U, 0)$, в структуре появляется новый четный уровень размерного квантования. Этот уровень возникает только в таких структурах, которые содержат нечетное число уровней при $b = 0$. С дальнейшим увеличением b уровни размерного квантования (кривые 1, 2) приближаются друг к другу и к уровню в изолированной яме. Зависимость $E_F(b)$

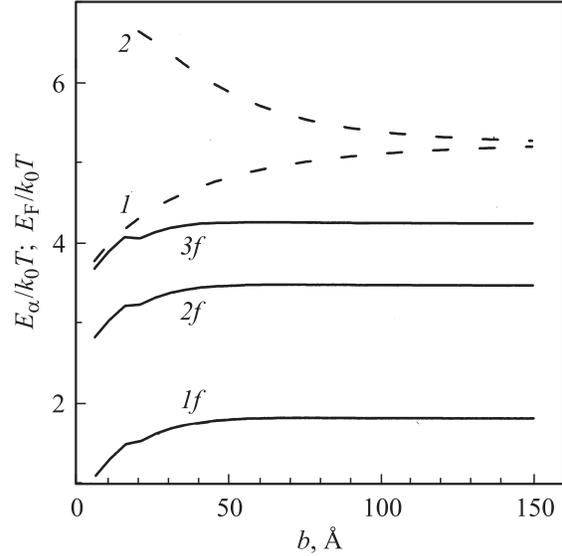


Рис. 1. Энергии уровней E_α (1, 2) и энергии Ферми E_F (1f, 2f, 3f) в ориентированных (100) структурах PbTe/Pb_{0.91}Eu_{0.09}Te с двойными КЯ как функции толщины b внутреннего барьера при $d_1 = d_2 = 20$ Å, $T = 300$ К. Концентрация электронов n , 10^{18} см⁻³: 1f — 1, 2f — 5, 3f — 10.

различна в двух областях — $b < b^*$ и $b > b^*$. При $b < b^*$ форма кривой $E_F(b)$ почти полностью повторяет форму $E_1(b)$, так что разность $E_1 - E_F$, которая влияет на величину коэффициента Зеебека, почти постоянна. Слабая зависимость $E_1 - E_F$ от b связана с зависимостью эффективных масс m_{x1} , m_{y1} от энергии уровня, а в рассматриваемой области b изменение E_1 относительно мало. Во второй области ($b > b^*$) уровни 1 и 2 приближаются друг к другу при увеличении b и зависимость E_F от b становится слабой. Значения энергий Ферми при таких b близки к соответствующим значениям в изолированной квантовой яме.

Малое нарушение симметрии между ямами приводит к малому изменению всех величин, за исключением волновых функций [27]. При больших расстояниях между ямами они подвергаются существенной перестройке в сравнении со строго симметричной структурой. Электроны на первом уровне локализируются в основном в более широкой яме, на втором уровне с очень близкой энергией — в более узкой яме и т.д. На рис. 2 показаны зависимости квантово-механических вероятностей $p_\alpha^{1,2}(b)$ нахождения электрона с квантовым числом α вблизи левой (p_α^1) или правой (p_α^2) КЯ.

Вероятности p_α^1 и p_α^2 определены как $p_\alpha^1 = \int_{-\infty}^0 |\xi_\alpha(z)|^2 dz$,

$p_\alpha^2 = 1 - p_\alpha^1$, где $\xi_\alpha(z)$ — электронная волновая функция (ВФ) в z -направлении. Как видно из рис. 2, при больших b ($b > 150$ Å) даже слабая асимметрия структуры ($d_1 - d_2 = 2$ Å) приводит к существенной перестройке ВФ и p_α^1 становится близкой к 1 (кривая 1). Зависимость $p_\alpha^2(b)$ при $d_1 - d_2 = 2$ Å практически совпадает с $p_\alpha^1(b)$ и здесь не показана. При увеличении степени

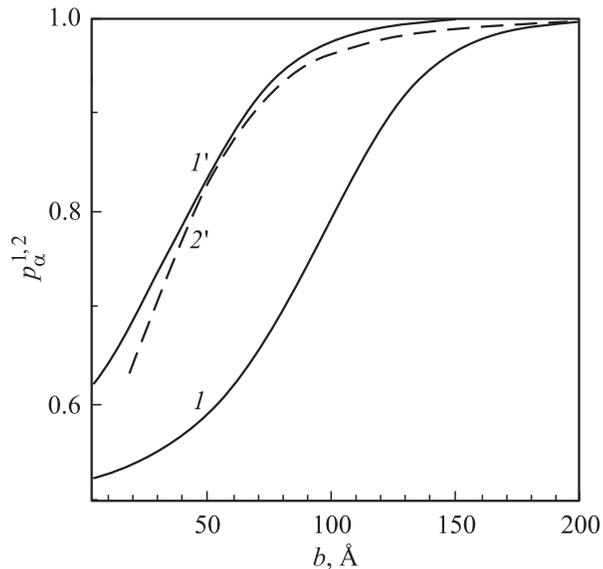


Рис. 2. Зависимости вероятностей $p_{\alpha}^{1,2}$ от расстояния b между ямами при $d_1 + d_2 = 40 \text{ \AA}$ и $d_1 - d_2 = 2 \text{ \AA}$ (1), 10 \AA ($1'$, $2'$). ($1, 1'$) — p_1^1 , $2'$ — p_2^2 .

асимметрии ВФ более быстро перераспределяются между ямами (кривые $1'$, $2'$). Волновая функция электронов на втором уровне более растянута в пространстве, и выполняется неравенство $p_2^2 < p_1^1$.

3. Кинетические коэффициенты

Транспорт носителей заряда вдоль квантовых ям рассматривался в предположении, что электрическое поле и градиент температуры параллельны друг другу и плоскостям ям. Для расчета электрической проводимости σ , подвижности μ и коэффициента Зеебека S был использован подход, основанный на решении системы кинетических уравнений Больцмана. Учитывалось рассеяние на объемных акустических и оптических фононах, внутриволноводные и межволноводные переходы носителей, непараболичность закона дисперсии электронов и многодолинный характер объемных материалов [15].

На рис. 3 представлены результаты вычислений подвижности электронов μ в зависимости от толщины внутреннего барьера в симметричных (кривая 1) и асимметричных (кривые $2, 3$) структурах. При $b < b^*$ подвижность существенно растет с увеличением b вследствие эффекта модуляции волновой функции [19]. Такое поведение подвижности обусловлено особенностями электрон-фононного взаимодействия в квазидвумерных системах, где закон сохранения импульса не налагает ограничений на проекцию q_z волнового вектора \mathbf{q} фононов. В процессах рассеяния могут участвовать фононы с любыми q_z , однако главный вклад дают фононы с $q_z < 1/d^{\text{ef}}$ [23], где d^{ef} — эффективная толщина локализации волновой функции (в КЯ с прямоугольным потенциалом и бесконечно высокими барьерами d^{ef}

равна толщине ямы). В структурах с двойными КЯ волновая функция более растянута в пространстве, чем в изолированной КЯ, d^{ef} увеличивается с увеличением b , число фононов, участвующих в рассеянии, уменьшается и, как результат, подвижность растет.

Возрастание подвижности заканчивается при $b = b^*$, когда начинает играть роль межволноводное рассеяние. Как и в двойных квантовых ямах на основе GaAs/GaAlAs [18–21], максимальное значение подвижности на 30% выше, чем в изолированных КЯ. Однако оно на 20% меньше подвижности в объемном PbTe, которая вычислялась таким же методом в тех же приближениях. При дальнейшем увеличении b уровни размерного квантования сближаются, темп столкновений растет и подвижность уменьшается.

Величина подвижности при больших b сильно зависит от симметрии структуры. Интегралы столкновений в кинетических уравнениях содержат форм-фактор, величина которого определяется перекрытием волновых функций. Это легко заметить в случае взаимодействия носителей с акустическими фононами, когда форм-фактор $I_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} |\xi_{\alpha}(z)|^2 |\xi_{\beta}(z)|^2 dz$. При взаимодействии носителей с оптическими фононами структура форм-фактора более сложная, однако он обладает таким же свойством. В результате различное поведение волновых функций в симметричных и асимметричных структурах при больших расстояниях между ямами сказывается на величинах всех кинетических коэффициентов.

В строго симметричных структурах подвижность носителей при больших b ниже, чем в изолированных квантовых ямах (кривая 1). Зависимость $\mu(b)$, подобная показанной кривой 1 , была получена в [20]. В асиммет-

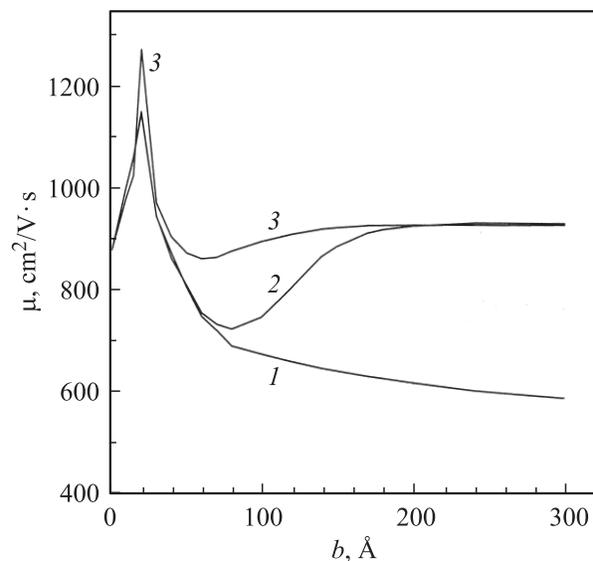


Рис. 3. Подвижность μ электронов в ориентированных (100) структурах PbTe/Pb_{0.91}Eu_{0.09}Te с двойными КЯ как функция толщины b внутреннего барьера при $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ К}$. 1 — $d_1 = d_2 = 20 \text{ \AA}$; 2 — $d_1 = 21 \text{ \AA}$, $d_2 = 19 \text{ \AA}$; 3 — $d_1 = 25 \text{ \AA}$, $d_2 = 15 \text{ \AA}$.

ричных структурах перестройка волновых функций подавляет межподзонное рассеяние с переходом электронов между ямами и подвижность снова начинает расти, достигая значений в изолированной КЯ при $b > 150 \text{ \AA}$. На кривых $\mu(b)$ появляется минимум (кривые 2, 3). Этот минимум более выражен в слегка асимметричных структурах. Как видно из рис. 3, подавление межподзонного рассеяния с переходом носителей между четными и нечетными уровнями существенно, более чем на 50%, увеличивает подвижность при больших b .

На рис. 4 показана зависимость коэффициента Зеебека от толщины внутреннего барьера в симметричных (кривая 1) и асимметричных (кривые 2, 3) структурах. При увеличении b коэффициент Зеебека слегка возрастает, достигая слабо выраженного максимума при $b = b^*$. Последний соответствует возникновению нового уровня размерного квантования, увеличению плотности состояний и включению межподзонного рассеяния. Значение S при $b = b^*$ немного меньше, чем в изолированной яме с такой же толщиной.

Подобно подвижности дальнейшее поведение $S(b)$ зависит от симметрии. В строго симметричных структурах коэффициент Зеебека увеличивается с увеличением b , достигая значений, на 20% больших по сравнению с изолированной КЯ. В слегка асимметричных структурах (кривая 2) зависимость $S(b)$ имеет максимум при тех же $b \approx 80 \text{ \AA}$, где подвижность минимальна. При больших b коэффициент Зеебека стремится к его значению в изолированной КЯ. Увеличение степени асимметрии сглаживает зависимость $S(b)$, и максимум при $b \approx 80 \text{ \AA}$ исчезает (кривая 3).

Численное исследование фактора мощности $P = \sigma S^2$ показало, что его максимальное значение достигается в структурах с тонкими квантовыми ямами и тонким

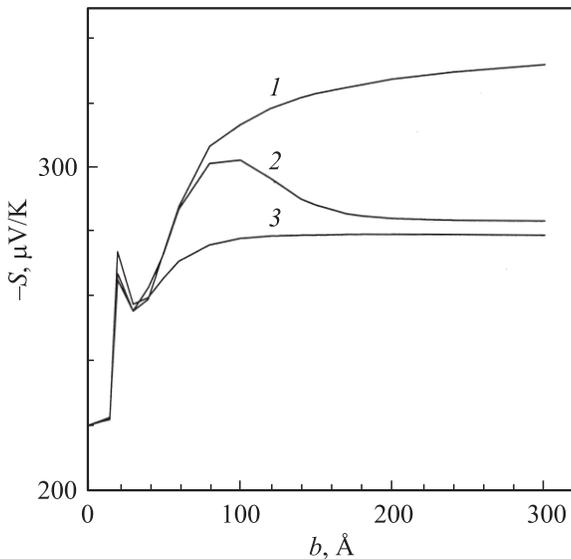


Рис. 4. Зависимости коэффициента Зеебека S от толщины b внутреннего барьера при $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ К}$. 1 — $d_1 = d_2 = 20 \text{ \AA}$; 2 — $d_1 = 21 \text{ \AA}$, $d_2 = 19 \text{ \AA}$; 3 — $d_1 = 25 \text{ \AA}$, $d_2 = 15 \text{ \AA}$.

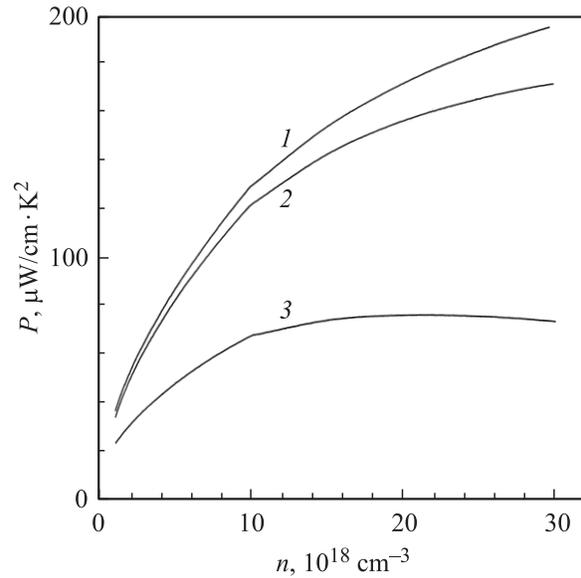


Рис. 5. Термоэлектрический фактор мощности P как функция концентрации носителей n в системах с двойными (1) и изолированными КЯ (2, 3) $\text{PbTe/Pb}_{0.91}\text{Eu}_{0.09}\text{Te}$ при $T = 300 \text{ К}$. 1 — $d_1 = d_2 = 20 \text{ \AA}$, $b = 20 \text{ \AA}$; 2 — $d = 20 \text{ \AA}$; 3 — $d = 40 \text{ \AA}$.

внутренним барьером. Хотя структуры с широким внутренним барьером имеют более высокий коэффициент Зеебека, эффект модуляции волновой функции [19] и соответствующее увеличение подвижности при $b = b^*$ полностью компенсируют уменьшение S . Рис. 5 иллюстрирует зависимость P от концентрации электронов n при $d_1 = d_2 = 20 \text{ \AA}$ и $b = 20 \text{ \AA}$ (кривая 1). С увеличением концентрации P растет. Как и в объемном материале, зависимость $P(n)$ имеет максимум при высоких концентрациях носителей заряда. Однако расчеты были выполнены до $n = 3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. При более высоких концентрациях разность $U - E_F$ становится меньше k_0T и в расчетах необходимо учесть вклад от непрерывного спектра. Для сравнения на рис. 5 показаны зависимости $P(n)$ в изолированных квантовых ямах при $d = 20$ и 40 \AA (кривые 2, 3). Видно, что фактор мощности двойных квантовых ям несколько выше, чем изолированных с такой же толщиной и концентрацией носителей заряда.

4. Заключение

Исследовано влияние асимметрии структуры с двойными квантовыми ямами на электронные состояния и кинетические коэффициенты. Расчеты показали, что режим изолированных КЯ для волновых функций и всех кинетических коэффициентов достигается только в системах с нарушенной симметрией. В строго симметричных структурах вследствие сильного межподзонного рассеяния подвижность при больших расстояниях между ямами существенно ниже, а коэффициент Зеебека выше, чем в изолированных ямах. Однако электронная волновая функция очень чувствительна к нарушению

симметрии между ямами. Сделан общий вывод, что существенная перестройка волновых функций даже в слегка асимметричных структурах с большим расстоянием между ямами приводит к подавлению межподзонного рассеяния с переходом электронов между ямами. Как результат, в зависимостях подвижности и коэффициента Зеебека от толщины внутреннего барьера появляются минимум и максимум соответственно, а при больших расстояниях между ямами все кинетические коэффициенты принимают значения, характерные для изолированных ям.

Теоретически исследованы термоэлектрические свойства ориентированных в плоскости (100) структур с двойными квантовыми ямами на основе $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Показано, что модуляция волновой функции приводит к увеличению не только подвижности, но и фактора мощности. Заметное возрастание подвижности и увеличение фактора мощности обеспечивается параметрами структуры, соответствующими максимально достижимой плотности состояний и минимальному влиянию межподзонного рассеяния.

Список литературы

- [1] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **47**, 12 727 (1993).
- [2] L.D. Hicks, T.C. Harman, M.S. Dresselhaus. *Appl. Phys. Lett.*, **65**, 3230 (1993).
- [3] T.C. Harman, D.L. Spears, M.J. Manfra. *J. Electron. Mater.*, **25**, 1121 (1996).
- [4] L.D. Hicks, T.C. Harman, X. Sun, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **53**, 10 493 (1996).
- [5] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, X. Sun, Z. Zhang, S.B. Cronin, T. Koga. *ФТТ*, **41**, 755 (1999) [*Phys. Sol. St.*, **41**, 679 (1999)].
- [6] T.L. Reinecke, D.A. Broido. *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 2834 (1997).
- [7] G.D. Mahan, L.M. Woods. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 4016 (1998).
- [8] A. Balandin, K.L. Wang. *J. Appl. Phys.*, **84**, 6149 (1998); A. Balandin, K.L. Wang. *Phys. Rev. B*, **58**, 1544 (1998).
- [9] T. Koga, T.C. Harman, S.B. Kronin, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **60**, 14 286 (1999).
- [10] A. Casian, I. Sur, H. Scherrer, Z. Dashevsky. *Phys. Rev. B*, **61**, 15 965 (2000).
- [11] D.A. Broido, T.L. Reinecke. *Phys. Rev. B*, **64**, 045 324 (2001).
- [12] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O'Quinn. *Nature*, **413**, 597 (2001).
- [13] T.C. Harman, D.J. Taylor, M.P. Walsh, B.E. La Forge. *Science*, **297**, 2229 (2002).
- [14] A.A. Balandin, O.L. Lazarencova. *Appl. Phys. Lett.*, **82**, 415 (2003).
- [15] I. Sur, A. Casian, A. Balandin. *Phys. Rev. B*, **69**, 035 306 (2004).
- [16] J.P. Heremans, C.M. Thrach, D.T. Morelli. *Phys. Rev. B*, **70**, 115 334 (2004).
- [17] Д.А. Пшенай-Северин, Ю.И. Равич. *ФТП*, **38**, 1251 (2004).
- [18] X.T. Zhu, H. Goronkin, G.N. Maracas, R. Droopad, M.A. Stroscio. *Appl. Phys. Lett.*, **60**, 2141 (1992).
- [19] T. Tsuchiya, T. Ando. *Phys. Rev. B*, **48**, 4599 (1993).
- [20] X.F. Wang, I.C. da Cunha Lima, X.L. Lei. *Phys. Rev. B*, **58**, 12 609 (1998).

- [21] В.Г. Мокеров, Г.Б. Галлиев, Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене. *ФТП*, **36**, 713 (2002).
- [22] E. de Andrada e Silva. *Phys. Rev. B*, **60**, 8859 (1999).
- [23] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437 (1982).
- [24] S. Yuan, H. Krenn, G. Springholz, Y. Ueta, G. Bauer, P.J. McCann. *Phys. Rev. B*, **55**, 4607 (1997).
- [25] G. Nimtz, B. Schlicht. *Narrow-Gap Semiconductors* (Berlin, Springer-Verlag, 1982.)
- [26] Ю.И. Равич, В.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогеидам свинца PbTe, PbSe и PbS* (М., Наука, 1968).
- [27] D.C. Reynolds, K.R. Evans, B. Jogai, C.E. Stutz, P.W. Yu. *Phys. Rev. B*, **46**, 4748 (1992).

Редактор Л.В. Шаронова

Thermoelectric properties of symmetrical and asymmetrical double quantum well structures

I.V. Sur

Technical University of Moldova,
MD 2001 Kishinev, Moldova

Abstract Theoretical analysis of electronic states and carrier transport in (100) oriented $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ double quantum wells is presented. Electron mobility and Seebeck coefficient were calculated and their dependencies on inner barrier width were examined in symmetrical and asymmetrical structures. It was found that at great distance between the wells even small violation of the structure symmetry and, consequently, essential reconstruction of the wave functions suppresses the intersubband scattering with carriers transfer between the wells and provides the correct limit to isolated quantum well in kinetic coefficients. Some possibilities of enhancement of thermoelectric power factor and suitable set of structure parameters calculated on the base of our model have been found.