

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СВЕРХРЕШЕТОК

Ю.В.Иванов, М.В.Веденников, Ю.И.Равич*

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург, Россия

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

Поступила в редакцию 10 января 1999 г.

Вычислены времена релаксации электронов на акустических фонах, коэффициенты электропроводности и термоЗДС фононного увлечения полупроводниковой сверхрешетки с квазидвумерными квантовыми ямами. Учтена неупругость рассеяния носителей заряда. Показано, что термоЗДС фононного увлечения сверхрешетки может на порядок превышать соответствующую термоЗДС массивного полупроводника.

PACS: 72.20.-i, 73.50.Lw

В работах [1–3] теоретически показано, что термоэлектрическая добротность¹⁾ сверхрешетки с достаточно узкими квантовыми ямами (КЯ) может на порядок превышать добротность массивного полупроводника, состав которого совпадает с составом материала КЯ. Этот результат является следствием ненулевой плотности состояний на дне нижней подзоны размерно-квантованного спектра электронов. При фиксированном химическом потенциале концентрация носителей заряда в КЯ, а вместе с ней и электропроводность КЯ оказываются больше соответствующих параметров трехмерного полупроводника. Появление возможности столь значительного увеличения термоэлектрической добротности привлекло большое внимание исследователей и резко повысило актуальность изучения термоэлектрических свойств низкоразмерных структур.

Авторы более поздних работ [4–6] обратили внимание на ряд других особенностей сверхрешеток. В частности, было исследовано влияние на термоэлектрические свойства уменьшения времени релаксации электронов вnanoструктурах с КЯ [6]. Хикс и Дрессельхаус предполагали [1–3], что подвижность носителей заряда не зависит от ширины квантовой ямы L . Однако давно известно [7], что в приближении упругого рассеяния электронов на акустических фонах время релаксации и подвижность носителей пропорциональны L . Плотность состояний обратно пропорциональна L . Следовательно, электропроводность сверхрешетки при фиксированном значении химического потенциала не должна зависеть от ширины КЯ. Другими словами, уменьшение подвижности компенсирует предсказанное в работах [1–3] увеличение термоэлектрической добротности. Тем не менее, некоторые особенности электрон-фононного взаимодействия в сверхрешетках все-таки могут в определенных условиях привести к существенному улучшению термоэлектрических свойств низкоразмерных структур. Две такие возможности рассмотрены в данной работе.

¹⁾ Термоэлектрическая добротность $Z = S^2 \sigma / \kappa$, где S , σ и κ – соответственно коэффициенты термоЗДС, электропроводности и теплопроводности материала. Этот параметр определяет к.п.д. термоэлектрического преобразователя энергии.

1. Использованное в указанных выше работах приближение упругого рассеяния носителей на акустических фонах не всегда применимо к сверхрешеткам. В трехмерном полупроводнике электрон с волновым вектором \mathbf{k} может взаимодействовать лишь с фононом, волновой вектор которого \mathbf{q} имеет длину $q \leq 2k$. В двумерной КЯ компонента k_z (ось z перпендикулярна плоскости КЯ) не определена. В соответствии с соотношением неопределенностей $\Delta k_z \sim 1/L$. Поэтому в КЯ в релаксационные процессы вовлекаются упругие возбуждения с $q_z \sim 1/L$ (мы предполагаем, что акустические фононы в сверхрешетке остаются трехмерными). С уменьшением L увеличивается фазовый объем "электронных" фононов, то есть фононов, взаимодействующих с носителями заряда. Это приводит к увеличению частоты электрон-фононных столкновений. Кроме того, из-за роста энергии электронных фононов оказывается возможным неупругое рассеяние носителей.

Мы рассмотрели неупругое рассеяние электронов на деформационном потенциале трехмерных акустических фононов в сверхрешетке с квазидвумерными КЯ. Для простоты потенциальные барьеры, разделяющие КЯ, предполагались предельно узкими и высокими. Исследовался лишь случай невырожденных носителей с изотропным параболическим спектром $\varepsilon(k)$. Вероятность перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ оказалась четной функцией второго аргумента с той же точностью, с которой указанное свойство выполняется при квазиупругом рассеянии в трехмерном полупроводнике. Это позволило ввести время электрон-фононной релаксации

$$\tau_{ep}^{-1} = \frac{mD^2(k_B T)^2}{2\pi\hbar^4\rho s_l^3} \int_{-y}^{\infty} x I^2(tx) N_0(x) dx , \quad (1)$$

где $N_0(x) = (\exp(x) - 1)^{-1}$, $I(u) = 8 \sin(\pi u/2)/\pi u(4 - u^2)$, $t = k_B T L / \pi \hbar s_l$, $y = \varepsilon(k)/k_B T$, m – масса носителей, D – константа деформационного потенциала, ρ – плотность материала, s_l – скорость продольного звука.

Используя (1), легко вычислить электропроводность σ^{2D} вдоль слоев сверхрешетки. Отношение этой электропроводности к электропроводности σ^{3D} трехмерного полупроводника, состав которого совпадает с составом материала КЯ, имеет вид

$$\frac{\sigma^{2D}}{\sigma^{3D}} = 12\pi^2 \frac{\langle \tilde{\tau}_{ep} \rangle_e^{2D}}{t} , \quad (2)$$

где

$$\langle F \rangle_e^{2D} = \int_0^{\infty} F(y) e^{-y} y dy , \quad (3)$$

а безразмерное время релаксации $\tilde{\tau}_{ep}$ отличается от τ_{ep} отсутствием множителя перед интегралом в (1). При расчете σ^{3D} , а также в приведенных ниже вычислениях использовано среднее время электрон-фононной релаксации трехмерного полупроводника $\langle \tau_{ep}^{3D} \rangle_e^{3D}$. Усреднение $\langle \dots \rangle_e^{3D}$ получается из (3) умножением подынтегрального выражения на $4y^{1/2}/3\pi^{1/2}$, а время релаксации τ_{ep}^{3D} хорошо известно [8].

Среднее $\langle \tilde{\tau}_{ep} \rangle_e^{2D}$ полностью определяется параметром t . Зависимость отношения (2) от t представлена на рис.1. При больших значениях произведения LT рассеяние электронов является квазиупругим и отношение электропроводностей, как и ожидалось, практически не отличается от единицы. Применение низкоразмерных

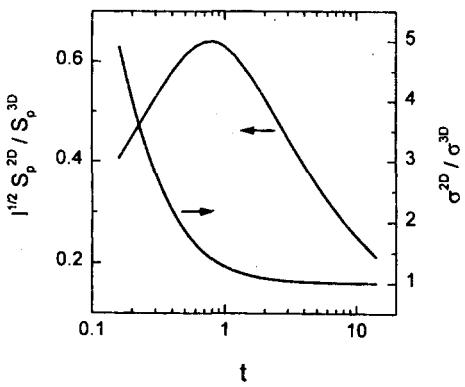


Рис.1. Зависимости приведенных коэффициентов термоэдс двухступенчатого увлечения и электропроводности сверхрешетки от приведенной температуры t

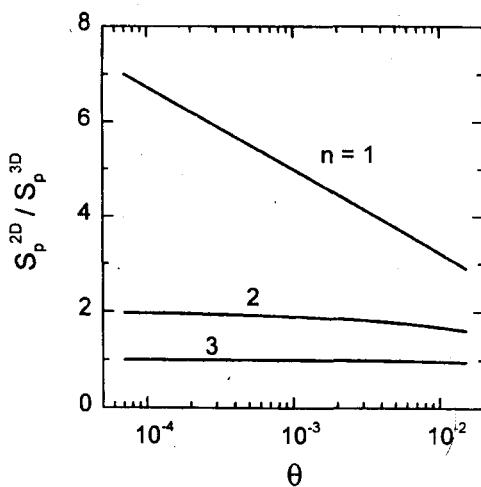


Рис.2. Зависимости приведенного коэффициента термоэдс увлечения Херринга от приведенной температуры θ для трех значений параметра рассеяния n

структур позволяет увеличить проводимость лишь при $t < 1$. Например, для сверхрешетки с $L \approx 2$ нм, $z_l \approx 5$ км/с данное неравенство выполняется при $T < 50$ К. Именно в этой области температур справедливы качественные выводы теории Хикса и Дрессельхаус [1–3].

2. Другим важным следствием увеличения электрон-фононного взаимодействия в сверхрешетках с КЯ является усиление фононного увлечения, проявляющееся в увеличении фононной составляющей термоэдс. Подобное усиление увлечения наблюдается в трехмерных полупроводниках в квантующем магнитном поле [9–11].

Следует различать два механизма увлечения. В чистых материалах преобладает фонон-фононное взаимодействие, и при низких температурах увлечение является двухступенчатым [9, 12, 13]. Поток тепловых фононов увлекает электронные фононы, которые, в свою очередь, увлекают электроны. Рассеяние на дефектах и примесях в "грязных" полупроводниках, а также процессы переброса при достаточно высоких температурах подавляют взаимодействие тепловых и электронных упругих возбуждений, поэтому в этих условиях в увлечении участвуют только электронные фононы [14].

Описанные процессы имеют место как в однородных полупроводниках, так и в сверхрешетках. Однако в последних электронные фононы являются более коротковолновыми. Частота их столкновений с тепловыми фононами велика. Поэтому двухступенчатое увлечение в сверхрешетках остается преобладающим при больших концентрациях дефектов и примесей и при более высоких температурах.

В общем случае разделить указанные процессы невозможно и описание увлечения сильно усложняется. Мы рассмотрели лишь отмеченные предельные случаи. Расчет двухступенчатого увлечения выполнен в гидродинамическом приближении [15]. Спектр упругих колебаний предполагался изотропным и линейным. Последнее предположение оправдано, так как в гидродинамическом приближении рассматриваются температуры, малые по сравнению с дебаевской. Вклад двухступенчатого

увлечения в коэффициент термоэдс сверхрешетки имеет вид

$$S_p^{2D} = \frac{m}{eT < \tau_{ep} >_e^{2D} < \nu_p^R s^{-2} >_p} . \quad (4)$$

Здесь ν_p^R – частота столкновений фононов, изменяющих полный квазимпульс упругой подсистемы (U -процессы, рассеяние на примесях и т. д.), s – скорость звука, e – заряд электрона,

$$< F >_p = \frac{\sum_j s_j^{-3} \int_0^\infty F_j(x) N'_0(x) x^4 dx}{\sum_j s_j^{-3} \int_0^\infty N'_0(x) x^4 dx} . \quad (5)$$

Индекс j нумерует ветви фононного спектра. Штрих обозначает производную по x . Среднее $< \tau_{ep} >_e^{2D}$ в (4) нетрудно рассчитать численно, используя (1) и (3). Сложнее оценить $< \nu_p^R s^{-2} >_p$. К счастью, в принятых приближениях второе среднее может быть выражено через решеточную теплопроводность κ . При этом вместо (4) получим

$$S_p^{2D} = \frac{45m\hbar^3}{2\pi^2 e (\sum_j s_j^{-3}) (k_B T)^4} \frac{\kappa}{< \tau_{ep} >_e^{2D}} . \quad (6)$$

Сравним вклады двухступенчатого увлечения в коэффициенты термоэдс сверхрешетки и массивного полупроводника. Выражение, описывающее вклад в коэффициент термоэдс трехмерного полупроводника [12], отличается от (4) только средним временем электрон-фононной релаксации²⁾. Поэтому

$$\frac{S_p^{2D}}{S_p^{3D}} = \frac{< \tau_{ep}^{3D} >_e^{3D}}{< \tau_{ep} >_e^{2D}} = \frac{2}{3(2\pi)^{5/2}} \frac{t^{1/2}}{l^{1/2} < \bar{\tau}_{ep} >_e^{2D}} , \quad (7)$$

где $l = m s_l L / \pi \hbar$ – безразмерная ширина КЯ. Правая часть соотношения определяется двумя параметрами: t и l . Ее зависимость от l монотонна и заключена в множителе $l^{-1/2}$. Комбинация $l^{1/2} S_p^{2D} / S_p^{3D}$, являющаяся функцией только t , представлена на рис.1. Именно эта функция определяет температурную зависимость отношения (7). Для сверхрешетки с фиксированной шириной КЯ увеличение термоэдс максимально при $k_B T \approx 0.75\pi\hbar s_l / L$. Следовательно, чем меньше ширина КЯ, тем в более высокотемпературную область сдвигается максимум температурной зависимости отношения (7).

Приведенная на рис.1 кривая позволяет оценить величину рассматриваемого эффекта. Если $m \approx 0.01m_0$, $s_l \approx 5$ км/с, $L \approx 3$ нм, то $\max(S_p^{2D} / S_p^{3D}) \approx 30$ при $T \approx 30$ К. Даже при $T = 100$ К $S_p^{2D} / S_p^{3D} \approx 20$. Следует, однако, отметить, что в трехмерных полупроводниках при температуре ~ 100 К двухступенчатое увлечение, по-видимому, не является доминирующим процессом и соотношение (4) может использоваться лишь для оценок сверху.

Более сложен расчет второго предельного процесса, трехмерным аналогом которого является увлечение Херринга [14]. Этот тип увлечения имеет место при больших

²⁾ Некоторые фонон-фононные процессы, нормальные в трехмерном полупроводнике, в сверхрешетке (из-за малого размера ее зоны Бриллюэна) превращаются в процессы переброса и могут увеличить ν_p^R [16]. Однако дополнительные U -процессы приводят к релаксации лишь поперечной к слоям компоненты полного квазимпульса фононной подсистемы.

температурах и/или концентрациях дефектов. Чтобы не усложнять задачу учетом рассеяния электронов на дефектах, мы рассмотрели лишь один из возможных вариантов, а именно, относительно высокие температуры и малые концентрации примесных атомов. Это ограничение позволило, в частности, использовать приближение упругого рассеяния носителей на фонах. Но даже после перечисленных упрощений достаточно простой результат удалось получить только для узких КЯ с $L \ll \pi\hbar/\sqrt{2mk_B T}$. Приведенное неравенство гарантирует сильную вытянутость фазового объема электронных фонаров вдоль оси симметрии сверхрешетки. Фононное увлечение в структуре с широкими КЯ, в которой электронные фононы локализованы вблизи центра зоны Бриллюэна, практически не отличается от увлечения в трехмерном полупроводнике.

Фононный вклад в коэффициент термоэдс сверхрешетки в рассматриваемом предельном случае может быть записан в виде

$$S_p^{2D} = \frac{m s_i^2}{eT} \frac{\langle\langle \tau_l \rangle\rangle_e^{2D} \langle e^{2D} \rangle_e^{2D}}{\langle \tau_{ep} \rangle_e^{2D}} . \quad (8)$$

Здесь τ_l – полное время релаксации продольных фононов; усреднение $\langle \dots \rangle_e^{2D}$ определено в (3);

$$\langle \tau_l \rangle^{2D} = \frac{\int_0^\infty \tau_l(q) \xi^3 I^2(p\xi) D(\xi) d\xi}{\int_0^\infty \xi^3 I^2(p\xi) D(\xi) d\xi} , \quad (9)$$

где $\xi = q/2k$, $p = 2kL/\pi$, $D(\xi) = [K(\xi) - E(\xi)]/\xi^2$ при $\xi \leq 1$ и $D(\xi) = [K(1/\xi) - E(1/\xi)]/\xi$ при $\xi > 1$, $K(\xi)$ и $E(\xi)$ – полные эллиптические интегралы соответственно первого и второго родов.

Формула (8) и формула, описывающая увлечение Херринга в трехмерном полупроводнике [8], отличаются только средними временами релаксации. Среднее время релаксации электронных фононов в трехмерной среде $\langle \tau_l \rangle^{3D}$ получается из (9) заменой в подынтегральных выражениях произведения $I^2(p\xi)D(\xi)$ единичной "ступенькой", обращающейся в нуль при $\xi > 1$. О средних типа $\langle \dots \rangle_e^{3D}$ говорилось выше.

Оценим опять отношение S_p^{2D}/S_p^{3D} . Предположим, что $\tau_l(q) \propto q^n$ [17]. Упрощая (1) с учетом упругости рассеяния электронов и выполняя интегрирование, где это возможно, получим

$$\frac{S_p^{2D}}{S_p^{3D}} = \frac{2(4-n)}{\pi \Gamma((5-n)/2)} \int_0^\infty dy e^{-y} y^{(3-n)/2} \int_0^\infty d\xi \xi^{3-n} I^2(\sqrt{8\theta y} \xi) D(\xi) , \quad (10)$$

где $\theta = k_B T L^2 m / \pi^2 \hbar^2$, $\Gamma(\dots)$ – гамма-функция. Отношение (10) является функцией лишь одной переменной θ и параметра n (≤ 3), определяющего механизм релаксации упругой подсистемы. Семейство кривых, описывающих эту зависимость, представлено на рис.2. Видно, что в данном пределе отношение S_p^{2D}/S_p^{3D} для механизма релаксации Саймонса ($n = 1$) [18] достаточно велико, но меньше, чем в случае двухступенчатого увлечения. Как уже отмечалось, двухступенчатое увлечение в сверхрешетках, в отличие от аналогичного увлечения в массивных полупроводниках, должно проявляться даже при достаточно высоких температурах. Поэтому приведенные на рис.2 данные определяют лишь нижнюю границу отношения фононных вкладов в коэффициенты термоэдс.

Из всего сказанного следует, что в области низких температур термоэдс, электропроводность и термоэлектрическая добротность сверхрешетки могут многократно превышать значения соответствующих коэффициентов массивного полупроводника. Отношение (2) значительно отличается от единицы лишь при $T \ll 100$ К. Однако фононное увлечение способно улучшить термоэлектрические свойства сверхрешетки в области азотных температур. Причем, в этом случае могут оказаться перспективными материалы с высокой решеточной теплопроводностью (см.(6)).

Увеличение термоэдс увлечения, значительно превосходящее рассмотренное, должно наблюдаться вnanoструктурах с одномерными КЯ из-за расширения фазового объема электронных фононов.

Работа поддержана программой "Интеграция", проект #75.

-
1. L.D.Hicks and M.S.Dresselhaus, Phys. Rev. **B47**, 12727 (1993).
 2. L.D.Hicks and M.S.Dresselhaus, Phys. Rev. **B47**, 16631 (1993).
 3. L.D.Hicks, T.C.Harman, and M.S.Dresselhaus, Appl. Phys. Lett. **63**, 3230 (1993).
 4. J.O.Sofo and G.D.Mahan, Appl. Phys. Lett. **65**, 2690 (1994).
 5. D.A.Broido and T.L.Reinecke, Phys. Rev. **B51**, 13797 (1995).
 6. D.A.Broido and T.L.Reinecke, Appl. Phys. Lett. **70**, 2834 (1997).
 7. B.K.Ridley, J. Phys. **C15**, 5899 (1982).
 8. А.И.Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, М.: Наука, 1978.
 9. Л.Э.Гуревич, Г.М.Недлин, ФТТ **3**, 2779 (1961).
 10. S.M.Puri, Phys. Rev. **139**, A995 (1965).
 11. П.С.Зырянов, Г.И.Гусева, УФН **95**, 565 (1968).
 12. В.А.Козлов, Э.Л.Нагаев, Письма в ЖЭТФ **13**, 639 (1971).
 13. А.А.Бельчик, В.А.Козлов, ФТП **20**, 53 (1986).
 14. C.Herring, Phys. Rev. **96**, 1163 (1954).
 15. Р.Н.Гуржи, УФН **94**, 689 (1968).
 16. Shang Yuan Ren and J.D.Dow, Phys. Rev. **B25**, 3750 (1982).
 17. C.Herring, Phys. Rev. **95**, 954 (1954).
 18. S.Simons, Proc. Phys. Soc. **83**, 749 (1964).