

ОСЦИЛЯЦІЙ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ У КВАНТОВИХ ЯМАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ СВИНЦЮ

Фреїк Д.М., Юрчишин І.К., Чобанюк В.М.

*Фізико-хімічний інститут Прикарпатського національного університету
імені Василя Стефаника
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, freik@pu.if.ua*

У роботі на основі теоретичної моделі квантової ями з безмежно високими стінками детально досліджено залежності термоелектричних параметрів від товщини наноструктур халькогенідів свинцю (PbTe, PbSe, PbS). Виявлено, що у таких структурах має місце немонотонний хід коефіцієнту Зеєбека S при зміні ширини ями. На основі періоду осциляцій $\Delta d_{\text{експ}}$ здійснено наближення теоретичних d -залежностей коефіцієнту S з експериментальними, та визначено значення енергії Фермі у відповідних наноструктурах. Показано, що мінімальна ширина квантової ями $d_{\text{мін}}$, при якій перший енергетичний рівень дорівнює енергії Фермі, співпадає з періодом осциляцій коефіцієнту Зеєбека у такій структурі.

Вступ

Останнім часом у процесі створення високоефективних термоелектричних матеріалів відбувалася інтенсифікація науково-дослідних робіт в області низькорозмірних структур [1, 2]. Пониження розмірності матеріалу створює умови для спостереження явища квантово-розмірного ефекту, який призводить до збільшення густини станів поблизу енергії Фермі. Це дозволяє зберегти достатньо значну електропровідність за порівняно низької енергії Фермі, при якій мають місце високі значення коефіцієнту Зеєбека S . Відчутний вплив квантових ефектів на термоелектричні характеристики можливий лише за умови, що розмір структури в напрямку обмеження зіставний з довжиною хвилі де Бройля носіїв. Дана умова виконується для структур у формі квантових ям [3–9], квантових дротів [10] і квантових точок [11–14], в яких створено розмірне обмеження в одному, двох і трьох напрямках відповідно. При цьому електронна густина станів демонструє помітне відхилення від звичайного параболічного закону у масивних матеріалах.

Поведінка термоелектричних параметрів (електро- і теплопровідності, коефіцієнту Зеєбека) у масивних матеріалах зазвичай описується в термінах електронних і фононних властивостей, які сильно змінюються при пониженні розміру зразка нижче мікрометрового діапазону, де квантові ефекти стають більш наглядними. Просторове обмеження акустичних фононів і відповідна модифікація групових швидкостей призводить до росту фононної швидкості релаксації, результатом чого є спад граткової теплопровідності [15]. Окрім цього, сильно змінюється характер взаємодії між частинками. Теоретичні обчислення, пов'язані з оцінкою вказаних ефектів на транспортні коефіцієнти зазвичай здійснюються в рамках розмірного квантового обмеження, яке базується на тому спрощенні, що електрони займають лише найнижчі підзони. Врахування багатьох підзон у структурах типу ями при такому підході може призвести до немонотонної зміни різних кінетичних параметрів, таких як рухливість, коефіцієнти Зеєбека і Холла [16].

Метою даної роботи була перевірка доцільності використання моделі безмежно глибокої прямокутної квантової ями (КЯ) шляхом побудови в її рамках теоретичних залежностей одного з термоелектричних параметрів (коефіцієнта Зеєбека) від товщини наноструктур PbS, PbSe і PbTe.

Теоретична модель

Для квантової ями з високими стінками електрони обмежені в напрямку oz , а в x - та y -напрямах їх рух вільний. Електронна хвильова функція і власні значення енергії за умови параболічності енергетичних зон визначаються виразами [17]:

$$\psi = \left(\frac{2}{\Omega}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(ik_x x + jk_y y) \sin\left(\frac{n\pi z}{d}\right), \quad (1)$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_z^* d^2} n^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}, \quad (2)$$

де $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, m_z^* - ефективна маса електрона вздовж напрямку обмеження; $m_p^* = \sqrt{m_x^* m_y^*}$, m_x^* , m_y^* - ефективні маси електрона вздовж осей ox та oy , Ω - загальний об'єм шару, d - ширина ями, n - квантове число, яке набуває величин натуральних чисел.

Електронне обмеження за рахунок зниження розміру зразка приводить до збільшення ширини забороненої зони E_g , що в свою чергу впливає на транспортні властивості. За рахунок квантування зони провідності зі зміною енергії густина станів змінюється стрибкоподібно. У залежності від амплітуди ймовірності електрони можуть знаходитися на будь-якій з підзон (E_1, E_2, \dots, E_n), з визначеною ймовірністю переходити з однієї зони на іншу найближчу зону і займають рівні до енергії Фермі [16].

У випадку квантової ями термоелектричні транспортні коефіцієнти можна отримати з рівнянь Больцмана, які записуються в припущенні, що електронна функція розподілу в стаціонарному стані залишається сталою і може змінюватися лише за рахунок зовнішніх сил і полів. Тоді система електронів повертається до рівноважного стану за рахунок різних релаксаційних процесів з характеристичними часами релаксації. Для квазідвовимірної системи можна записати [18]:

$$\sigma = \frac{e^2}{T} \Gamma^1, \quad (3)$$

$$S = \frac{E_F}{eT} + \frac{1}{eT} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^1}, \quad (4)$$

$$k_e = \frac{1}{T} \Gamma^3 - \frac{1}{T} \sigma \left(\alpha T - \frac{E_F}{e} \right)^2, \quad (5)$$

де σ - електропровідність, S - коефіцієнт Зеебека, k_e - електронна складова теплопровідності, E_F - енергія Фермі.

Транспортний коефіцієнт Γ визначається напівкласичним підходом, згідно з яким частинки обмежені в одномірній коробці. При цьому температурний градієнт і електричне поле направлені вздовж осі ox . Тоді:

$$\Gamma^1 = -\zeta^{(0)}, \quad (6)$$

$$\Gamma^2 = \zeta^{(1)}, \quad (7)$$

$$\Gamma^3 = -\zeta^{(2)}, \quad (8)$$

де :

$$\zeta^{(s)} = \frac{2T}{\pi a} \sqrt{\frac{m_y^*}{m_x^*}} \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^\infty E^n \tau \varepsilon \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (9)$$

Тут f - функція розподілу Фермі, $\varepsilon = E - E_n$, τ - час релаксації, який у випадку розсіювання на акустичних фононах має вигляд [19]:

$$\frac{1}{\tau_{ac}} = \frac{3\Xi^2 m^{*2}}{\rho \hbar^3 a}. \quad (10)$$

де Ξ - деформаційний потенціал, ρ - густина і m^* - ефективна маса матеріалу. Як видно з (10), час релаксації не залежить від енергії, тому його можна винести за межі інтегралу.

За цієї умови коефіцієнт Зеебека S визначається як:

$$S = \frac{k_B}{e} \left[\frac{E_F}{k_B T} - \frac{A_1 + A_2}{A_3} \right], \quad (11)$$

де:

$$A_1 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x^2 \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right), \quad (12)$$

$$A_2 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} E'_n \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right), \quad (13)$$

$$A_3 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right). \quad (14)$$

Функція розподілу Фермі має відомий вигляд:

$$f_n = \frac{1}{e^{x-\eta_n} + 1}, \quad (15)$$

де $x = \frac{\varepsilon}{k_B T}$ - понижена енергія носія, а $\eta_n = \xi - E'_n$. Тут $\xi = \frac{E_F}{k_B T}$ і $E'_n = \frac{E_n}{k_B T}$.

Результати досліджень та їх обговорення

Описану вище теоретичну модель було застосовано до структур квантових ям PbS, PbSe, PbTe при 300 К. Розрахунки проводились для різної ширини ями при заданих значеннях енергії Фермі, яка, як відомо, є функцією концентрації і температури.

Результатом побудови d-залежності коефіцієнта Зеебека в рамках розмірного квантового обмеження, яке припускає, що всі електрони займають найнижчу зону ($n = 1$), є спадна функція типу експоненти (рис. 1). Врахування більшої кількості зон, які займають електрони ($n = 2, n = 4$) призводить до росту коефіцієнту S за величиною [16]. Однак немонотонний характер зміни термоелектричних параметрів можна отримати лише при врахуванні всіх зон нижче енергії Фермі. При цьому залежність коефіцієнту Зеебека S від ширини ями характеризується розривами з певним періодом (рис. 1). Збільшення ширини ями на величину півхвилі Фермі призводить до появи нової заповненої підзони нижче енергії Фермі. При ширині заповнення нової зони у густині станів спостерігається стрибок, що і призводить до осциляційної поведінки. Зазначимо, що розрахункова процедура, на основі якої побудовано залежності $S(d)$ для трьох халькогенідів свинцю (рис. 2), враховує різну кількість заповнених зон для різної ширини ями при фіксованій енергії Фермі.

Виходячи з експериментальних залежностей [7-9], які демонструють немонотонний, осциляційний характер зміни коефіцієнту Зеебека зі зміною товщини конденсату (яка є рівною ширині квантової ями), можемо припустити, що лише врахування всіх зон нижче енергії Фермі може забезпечити певну узгодженість даної моделі КЯ з експериментом. Зміна значення рівня Фермі призводить до зміни в періоді осциляцій. Якщо визначати період осциляцій $\Delta d_{\text{експ}}$, виходячи з експериментальних залежностей (рис. 3), то це призводить до фіксованого значення енергії Фермі, яке, разом із значенням ефективної маси, характеризує конкретну сполуку у формі квантової ями. На рис. 1 наведено d-залежності коефіцієнту Зеебека для КЯ PbS, PbSe, PbTe з експериментально визначеним періодом осциляцій $\Delta d_{\text{експ}}$, а у табл. 1 – значення енергії Фермі E_F , які при цьому отримуються.

В експериментальних роботах [7-9] досліджено транспортні властивості квантових ям PbS, PbSe і PbTe, вирощених методом молекулярно-променевої епітаксії на підкладках KCl і покритих шаром EuS. При цьому в обговоренні всіх трьох робіт

наводиться формула для періоду осциляцій термоелектричних параметрів, виведена на основі моделі простої, безмежно глибокої потенціальної ями:

$$\Delta d = \frac{\lambda_F}{2} = \frac{h}{\sqrt{8m_z^* E_F}} \quad (16)$$

Довжина хвилі Фермі λ_F і число заповнених підзон N виражаються через енергію Фермі:

$$\lambda_F = \frac{h}{\sqrt{2m_z^* E_F}} \quad (17)$$

$$N = \frac{2d}{\lambda_F} = \frac{2d}{h} \sqrt{2m_z^* E_F} \quad (18)$$

Оцінюючи значення енергії Фермі на основі експериментально визначених величин концентрації носіїв і підставляючи E_F у (17), автори [7-9] порівнюють отримані періоди осциляцій з його експериментальними значеннями. При цьому на відміну від КЯ PbS і PbTe для КЯ PbSe отримується добре співпадіння з експериментом: $\Delta d_{\text{теор}} = 27\text{нм}$ і $\Delta d_{\text{експ}} \approx 35\text{нм}$ [8].

Кількість квантованих рівнів, що лежать нижче заданої енергії, визначається першою частиною (2):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_z^* d^2} n^2. \quad (19)$$

Підставляючи у (19) значення енергії Фермі, можна знайти товщину d , при якій нижче рівня Фермі лежить задана кількість рівнів n . Різниця між значеннями цієї товщини для двох найближчих рівнів визначатиме період осциляцій Δd , який буде рівний товщині $d_{\text{мін}}$, при якій дно найнижчої підзони співпадає з енергією E_F . Таким чином, (16) впливає з (19) і $\Delta d = d_{\text{мін}}$.

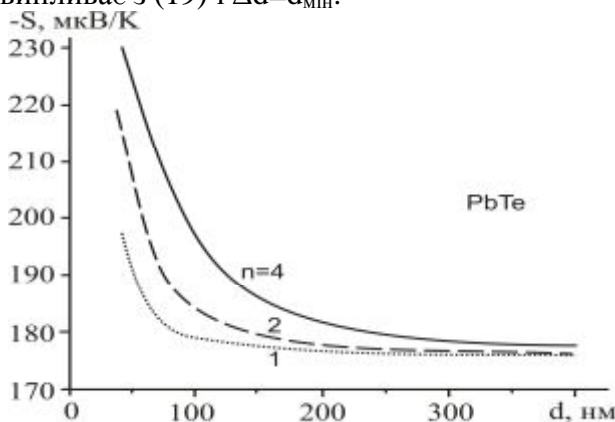


Рис. 1. Залежність коефіцієнту Зеебека від ширини КЯ PbTe з безмежно високими стінками при $n=1, 2, 4$; $E_F = 129,3 \cdot 10^{-4}\text{ еВ}$ [16].

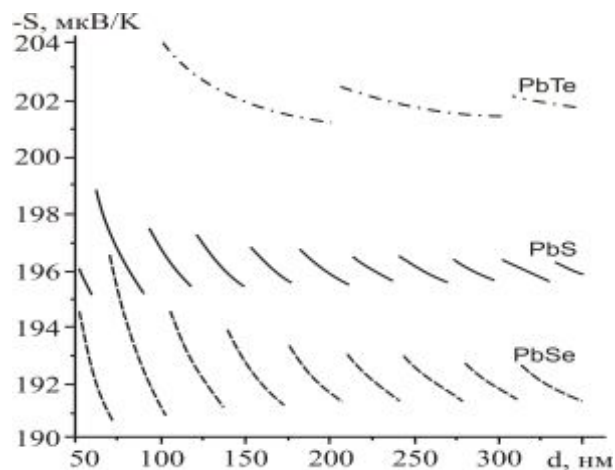


Рис. 2. Залежність коефіцієнту Зеебека від ширини КЯ PbS, PbSe, PbTe у моделі безмежно глибокої потенціальної ями.

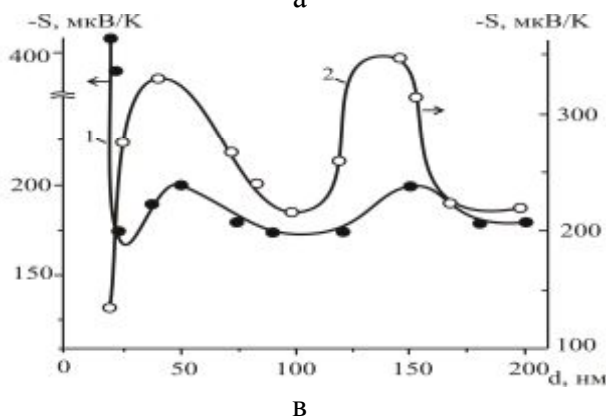
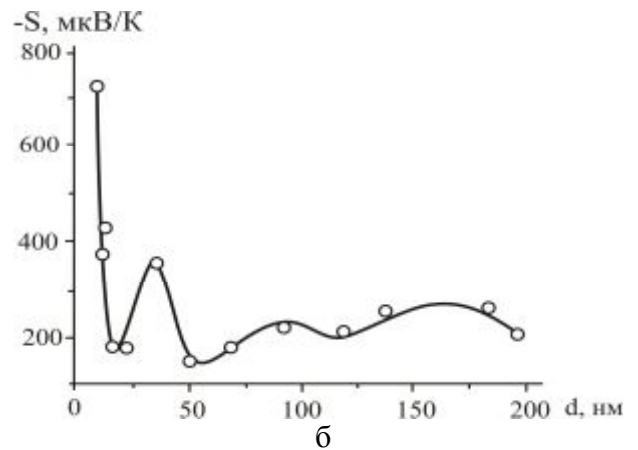
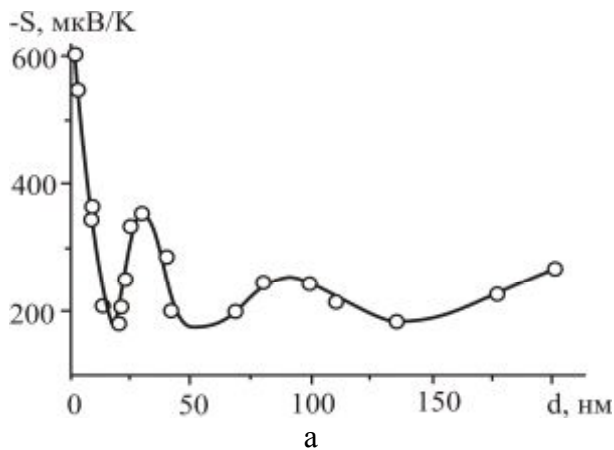


Рис. 3. Залежність коефіцієнту Зеєбека S від товщини шару КЯ PbS (а), PbSe (б), PbTe (в) (крива 1 – стехіометричний, крива 2 – з 2 ат.% додаткового свинцю) перемешованих між діелектриками (100) KCl і EuS при $T=300$ К [7-9].

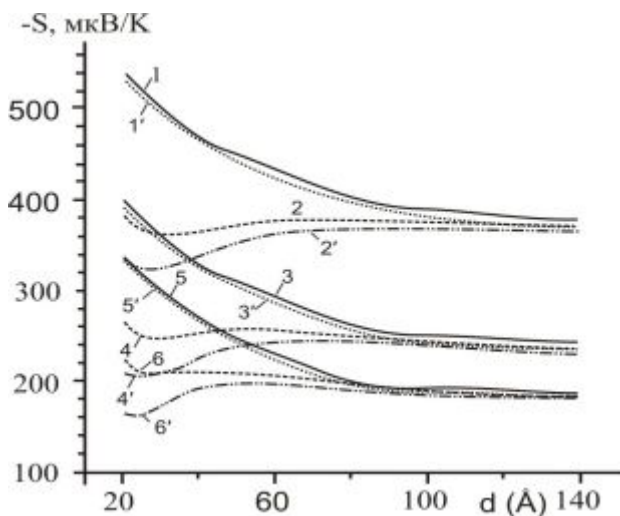


Рис. 4. Залежність коефіцієнту Зеєбека S (б) КЯ PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe від ширини d для орієнтацій КЯ (100) (криві 1, 1', 3, 3', 5, 5') і (111) (криві 2, 2', 4, 4', 6, 6'): 1, 2, 3, 4, 5, 6 потенціальний бар'єр $U=171$ меВ ($x=0.073$); 1', 2', 3', 4', 5', 6' $U=250$ меВ, $T=300$ К. Криві 1, 1', 2, 2' обраховані для $n=10^{18}$ см⁻³; 3, 3', 4, 4' для $n=5 \cdot 10^{18}$ см⁻³, 5, 5', 6, 6' для $n=10^{19}$ см⁻³ [4].

Таблиця 1. Величини періоду осциляцій ($\Delta d_{\text{експ}}$), ефективної маси (m_z^*) та обрахованої на їх основі енергії Фермі (ϵ_F) для наноструктур халькогенідів свинцю

Структури	$\Delta d_{\text{експ}}$, нм	m_z^*	Енергія Фермі ϵ_F , еВ
KCl(001)/n-PbS/EuS	30	0,08 m_e	$5,17 \cdot 10^{-3}$
KCl(001)/n-PbSe/EuS	35	0,04 m_e	$7,75 \cdot 10^{-3}$
KCl(001)/n-PbTe/EuS	100	0,024 m_e	$1,55 \cdot 10^{-3}$

У розглянутому підході експериментальні значення періоду осциляцій є рівними мінімальній ширині КЯ $d_{\text{мін}}$, при якій квантово-розмірні ефекти є основним фактором,

що обумовлює немонотонний хід товщинних залежностей ТЕ-параметрів відповідних структур. Тож, досить велике значення періоду осциляцій у КЯ PbTe ($\Delta d = d_{\min} = 100$ нм) може свідчити про те, що при менших ширинях ями пріоритет у визначенні немонотонного ходу d -залежностей ТЕ-параметрів належить іншим процесам. Так, зокрема, автори [20] немонотонний хід ТЕ-параметрів для наноструктур PbTe пояснюють конкуренцією між квантово-розмірними ефектами і перколяційними процесами, які визначають перехід від острівкової до суцільної структури. Це саме стосується сполук PbS і PbSe.

Порівнюючи рис. 1 з рис. 2, можна підмітити невідповідність між амплітудами осциляцій теоретичних (рис. 2) і експериментальних d -залежностей (рис. 3) коефіцієнту Зеєбека. Так, зокрема, для КЯ PbSe максимальне значення осциляційної амплітуди в теоретичній моделі становить 5,5 мкВ/К, тоді як експериментальне - ~ 190 мкВ/К для товщин більших за d_{\min} . Цю невідповідність ми пояснюємо недосконалістю теоретичної моделі, зокрема, накладеним на модель КЯ обмеженням, яке припускає безмежність висоти потенціальних бар'єрів, неврахуванням непараболічності енергетичних зон, інших механізмів розсіювання і поверхневих ефектів.

У теоретичній роботі [4] для структури КЯ PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe при 300 К показано, що зменшення висоти потенціального бар'єру призводить до росту коефіцієнту Зеєбека. Так на рис. 4 криві 1, 2, 3, 4, 5, 6, для яких потенціальний бар'єр $U=171$ меВ ($x=0.073$), лежать вище за криві 1', 2', 3', 4', 5', 6 з висотою бар'єру $U=250$ меВ. Те ж саме можна сказати про коефіцієнт термоелектричної потужності $S^2\sigma$ [4]. Отже, зменшення висоти потенціального бар'єру призведе до збільшення величини коефіцієнту Зеєбека.

Відсутність осциляцій на рис. 4 пояснюється малим діапазоном товщин, для яких розраховувалось значення коефіцієнту S ($d \approx 2 - 14$ нм), і, відповідно, малою кількістю підзон, що лежать нижче енергії Фермі. Це показано у [16] для КЯ PbTe, де при $n = 1, 2, 4$ не зафіксовано осциляційної d -залежності для коефіцієнту S і, як уже було сказано, ці залежності є плавними спадними функціями типу експоненти, схожими на ті, що на рис. 4 (рис. 1). Врахування обмеженості висоти потенціальних бар'єрів, а також визначення інших двох ТЕ-коефіцієнтів (σ і k) для розрахунку d -залежностей термоелектричних добротностей відповідних структур буде здійснено у наших наступних роботах.

Висновки

Показано, що товщинна залежність коефіцієнту Зеєбека S , побудована на основі моделі квантової ями з безмежно високими стінками, характеризується розривами з певним періодом. На основі експериментальних даних для періодів осциляцій $\Delta d_{\text{експ}}$ товщинних залежностей коефіцієнту Зеєбека визначено значення енергії Фермі у структурах КЯ халькогенідів свинцю. Невідповідність між амплітудами осциляцій теоретичних і експериментальних d -залежностей коефіцієнту Зеєбека пояснено спрощеною теоретичною моделлю квантової ями. Показано, що значення періоду осциляцій $\Delta d_{\text{експ}}$ квантових ям рівні ширині КЯ d_{\min} , при якій дно найнижчої підзони співпадає з енергією Фермі E_F . Товщині d_{\min} надано змісту мінімальної ширини КЯ, починаючи з якої квантово-розмірні ефекти є основним фактором, що обумовлює немонотонний хід товщинних залежностей термоелектричних параметрів відповідних наноструктур.

Робота виконана згідно наукових проектів НАН України (Державний реєстраційний номер 0110U006281) та ДФФД Державного агентства з питань науки, інновації та інформації України (Державний реєстраційний номер 0110U007674).

Лірэпаратыя

1. Davies J.H. The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction. – Cambridge university press, 1998. – 451 p.
2. 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. – N 19. – P. 1043–1053.
3. Hicks L.D., Harman T.C., Sun X., Dresselhaus M.S. Experimental study of the effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit // *Phys. Rev. B.* – 1996. – V. 53, N 16. – P.10493-1–10493-4.
4. Casian A., Sur I., Scherrer H., Dashevsky Z. Thermoelectric properties of n-type PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe quantum wells // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 61, N 23 – P. 15965–15974.
5. Harman T.C., Spears D.L., Manfra M.J. High thermoelectric figures of merit in PbTe quantum wells // *J. Electron. Mater.* – 1996. – V. 25. – P. 1121–1127.
6. Sur I., Casian A., Baladin A. Electronic thermal conductivity and thermoelectric figure of merit of n-type PbTe/PbEuTe quantum wells // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V.69. – P. 035306.
7. Rogacheva E.I., Nashchekina O.N., Vekhov Y.O., Dresselhaus M.S., Cronin S.B., Effect of thickness on the thermoelectric properties of PbS thin films // *Thin Solid Films.* – 2003. – N 423. – P. 115–118.
8. Rogacheva E.I., Tavrina T.V., Nashchekina O.N., Grigorov S.N., Nasedkin K.A., Quantum size effects in PbSe quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – V. 80, N 15. – P. 2690–2692.
9. Rogacheva E.I., Nashchekina O.N., Grigorov S.N., Dresselhaus M.S., Cronin S.B., Oscillatory behaviour of the transport properties in PbTe quantum wells // *Nanotechnology.* – 2003. – V. 14, N 1. – P. 53–59.
10. Lin Yu-Ming, Dresselhaus M.S. Thermoelectric properties of superlattice nanowires // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68 – P. 075304–075318.
11. Springholz G., Holy V., Pinczolits M., Bauer P., Bauer G. Self-organized growth of three-dimensional quantum-dot crystals with fcc-like stacking and a tunable lattice constant // *Science.* – 1998. – N 282. – P. 734–737.
12. Springholz G., Pinczolits M., Mayer P., Holy V., Bauer G., Kang H., Salamanca-Riba L. Tuning of vertical and lateral correlations in self-organized PbSe/Pb_{1-x}Eu_xTe quantum dot superlattices // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V 84. – P. 4669–4672.
13. Harman T.C., Walsh M.P., LaForge B.E., Turner G.W. Nanostructured thermoelectric materials // *J. Electronic Mater.* – 2005. – V. 34, № 5 – L19L22.
14. Harman T.C., Taylor P.J., Walsh M.P., LaForge B.E. Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices // *Science.* – 2002. – N 297. – P. 2229.
15. Baladin A., Wang K.A. Effect of phonon confinement on the thermoelectric figure of merit of quantum wells // *J. Appl. Phys.* – 1998. – V. 84. – P. 6149.
16. Singh M.P., Bhandari C.M. Non-monotonic thermoelectric behavior of lead telluride in quantum-well-like structures // *Solid State Commun.* – 2005. – V. 133. – P. 29–34.
17. Bhandari C.M. in: D.M. Rowe (ed.) *CRC Handbook of Thermoelectrics (chapters 4–6).* – CRC Press, 1995 – 701 p.
18. Drabble J.R., Coldsmid H.J. *Thermal conduction in semiconductors (chapter 4).* – London: Pergaman Press, 1961. – P. 105.
19. Ridley B.K. *Electrons and phonons in semiconductor multilayers* – Cambridge: University Press, 2009. – 294 p.

20. Rogacheva E.I., Krivulkin I.M., Nashchekina O.N., Sipatov A.Yu, Volobuev V.A., Dresselhaus M.S. Percolation transition of thermoelectric properties in PbTe thin films // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V.78, N 21. – P. 3238–3240.

ОСЦИЛЛЯЦИИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Д.М. Фреик, И.К. Юрчишин, В.М. Чобанюк

*Физико-химический институт Прикарпатского национального университета
имени Василия Стефаника
ул. Шевченко, 57, Ивано-Франковск, 76025, Украина, freik@pu.if.ua*

В работе на основе теоретической модели квантовой ямы с бесконечно высокими стенками детально исследованы зависимости термоэлектрических параметров от толщины наноструктур халькогенидов свинца (PbTe, PbSe, PbS). Выявлено, что в таких структурах имеет место немонотонный ход коэффициента Зеебека S при изменении ширины ямы. На основе периода осцилляций $\Delta d_{\text{эксп}}$ достигнуто приближение теоретических d -зависимостей коэффициента S с экспериментальными, и определены значения энергии Ферми в соответствующих наноструктурах. Показано, что минимальная ширина квантовой ямы $d_{\text{мин}}$, при которой первый энергетический уровень равен энергии Ферми, совпадает с периодом осцилляций коэффициента Зеебека в такой структуре.

OSCILLATIONS OF THERMOELECTRIC PARAMETERS WITHIN QUANTUM WELLS OF LEAD CHALCOGENIDES

D.M. Freik, I.K. Yurchyshyn, V.M. Chobaniuk

*Physical-Chemical Institute, Carpathian National University named after Vasil Stefanik
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, freik@pu.if.ua*

Basing on The theoretical model for quantum well with infinitely high walls, thickness dependences for thermoelectric parameters of lead chalcogenides (PbTe, PbSe, PbS) nanostructures have been investigated in detail. It has been found that nonmonotonous behavior of Seebeck coefficient S with changing the well thickness in these structures takes place. Basing on the oscillations period Δd_{exp} the approximation of theoretical d -dependencies of Seebeck coefficient S with experimental was carried out and the Fermi energy in the respective structures was determined. It has been shown that minimum quantum well width d_{min} coincides with oscillations period Δd_{exp} of Seebeck coefficient in this structure when the first energy level is equal to Fermi energy E_F .