

## YARIMKEÇİRİCİ KVANT ÇUXURLARINDA VƏ HƏCMİ KRİSTALLARDA TERMOELEKTRİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİ

M.M. BABAYEV, X.B. SULTANOVA

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu

AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr. 131

[mirbababayev@yahoo.com](mailto:mirbababayev@yahoo.com)

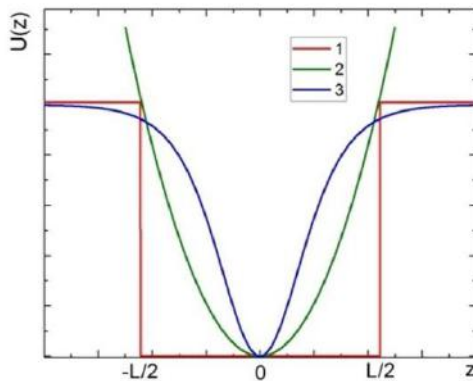
Pöşl-Teller məhdudlayıcı potensialı yarımkeçirici kvant çuxurunda termoelektrik hərəkət qüvvəsinə səpici potensialların ekranlaşmasının təsiri tədqiq edilmişdir. GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvant çuxurunda aparılan ədədi hesablamalar göstərir ki, elektronların istənilən cırılma dərəcəsində, yəni onların istənilən səth sıxlığında ekranlaşmanın təsiri ilə termoelektrik azalır. Azalma zəif cırılmış elektron qazında kiçik (bir neçə faiz) olur, güclü cırılmış elektron qazında isə bu azalma 15-30% təşkil edir. Kvant çuxurunda alınan nəticələr GaAs kristalında 3-ölçülü elektron qazının termoelektrik hərəkət qüvvəsi ilə müqayisə edilmişdir.

**Açar sözlər:** Kvant çuxuru, Pöşl-Teller potensialı, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.

**PACS:** 73.50 Lw; 73.63 Hs

### I. GİRİŞ

Son onilliklərdə fizikanın ən mühüm istiqamətlərindən birinə çevrilmiş nanokristallar fizikası sahəsində mühüm məsələlərdən biri 2-ölçülü yarımkeçirici elektron qazında (kvant çuxurlarında) termoelektrik hərəkət qüvvəsinin (termoelektrik) tədqiqidir. Yarımkeçirici kvant çuxurlarında termoelektrik [1-5] işlərində eksperimental və nəzəri yolla tədqiq edilmişdir. Nəzəri hesablamalarda kvant çuxurunda məhdudlayıcı potensialın forması, yəni potensialın koordinatdan asılılığı nəticəyə ciddi təsir göstərir. Bu asılılığın şəkli dəqiq məlum olmadığı üçün elmi ədəbiyyatda müxtəlif modellərdən istifadə edilir (şəkil 1).



Şəkil 1. Kvant çuxurlarında məhdudlayıcı potensialın müxtəlif modelləri: 1- sonlu düzbucaqlı, 2- parabolik və 3- modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialı kvant çuxurları (L-kvant çuxurunun enidir).

[1-3] işlərində düzbucaqlı, [4] işində parabolik, [5] işində isə modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialı kvant çuxurlarında termoelektrik nəzəri tədqiq

edilmiş, termoelektrik-nin temperaturdan və elektronların konsentrasiyasından asılılıqları öyrənilmişdir, lakin bu işlərin heç birində alınan nəticələrin 3-ölçülü kristallarda yaradılan termoelektrik ilə müqayisəsi aparılmamışdır.

Bu işdə məqsəd modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialı yarımkeçirici kvant çuxurlarında yaradılan temperatur qradienti nəticəsində meydana çıxan termoelektrik-ni 3-ölçülü kristalda yaranan termoelektrik ilə müqayisə etmək və termoelektrik-yə səpici potensialların ekranlaşmasının təsirini müəyyən etməkdir. Elektronların aşqar ionlardan, akustik fononların deformasiya və pyezo-potensialından səpilməsi nəzərə alınır, Debay temperaturundan (GaAs üçün 360K) çox aşağı temperaturlara baxdığımız üçün optik fononlardan səpilmə nəzərə alınmır.

### II. TERMOELEKTRİK-NİN ÜMUMİ İFADƏSİ

Nümunədə temperatur qradienti ( $\nabla_x T$ ) yarananda elektronların bu qradientə mütənəsb olan  $j_d = -\frac{k_0}{e} J_1 \nabla_x T$  diffuzion cərəyanı yaranır, bunun nəticəsində yaranan elektrik sahəsinin təsiri ilə əks istiqamətdə  $j_{el} = J_0 E_x$  elektrik cərəyanı əmələ gəlir. Burada  $E_x = -\nabla_x \varphi$ ,  $\varphi = \varphi_0 - \frac{\zeta}{e}$  - elektrokimyəvi potensial,  $\varphi_0$  -elektrik potensialı,  $(-e)$  - elektronun yükü,  $k_0$  - Bolsman sabitidir. Yaranan termoelektrik stasionarlıq şərtindən ( $j = j_{el}$ ) tapılır və həm 2-ölçülü, həm də 3-ölçülü halda aşağıdakı şəkildə olur:

$$\alpha = \frac{E_x}{\nabla_x T} = -\frac{k_0}{e} \cdot \frac{J_1}{J_0} \quad (1)$$

#### II a) 3-ölçülü halda termoelektrik

Bu halda (1) ifadəsinə daxil olan  $J_0$  və  $J_1$  inteqralları aşağıdakı şəkildədir[6] :

$$J_i^{(3)} = \frac{2e^2 \sqrt{2m} (k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty x^{\frac{3}{2}} dx \frac{e^{x-\eta_3}}{(e^{x-\eta_3}+1)^2} \tau_3(x) (x-\eta)^i ; i = 0, 1 \quad (2)$$

Burada  $\eta_3 = \frac{\zeta}{k_0 T}$  – həcmi kristalda elektronların gətirilmiş kimyəvi potensialı,  $k_0$  – Bolsman sabiti,  $\zeta$  – kimyəvi potensialdır. Elektronların istənilən cırlaşma dərəcəsində gətirilmiş kimyəvi potensial

$$n_3 = \frac{(2mk_0T)^{\frac{3}{2}}}{3\pi\rho\hbar^3} \int_0^\infty x^{\frac{3}{2}} dx \frac{e^{x-\eta_3}}{(e^{x-\eta_3}+1)^2} \quad (3)$$

tənliyinin həllindən ədədi hesablamalarla tapılır. Bu ifadələrdə  $m$  – elektronların effektiv kütləsi,  $\rho$  – kristalın sıxlığı,  $n_3$  - elektronların 3-ölçülü konsentrasiyası,  $\tau_3(x)$  - həcmi kristalda elektronların relaksasiya müddətidir:  $\tau_3(x) = (v_{ak3} + v_{pz3} + v_{i3})^{-1}$ ,  $v_{i3}$ ,  $v_{ak3}$  və  $v_{pz3}$  – üçölçülü halda elektronların, uyğun olaraq, ionlardan, akustik fononların deformasiya və pyezoelektrik potensiallarından səpilməsində relaksasiya tezlikləridir [6]:

$$v_{i3} = \frac{\pi e^4 n_{i3}}{\chi^2 (2m)^{\frac{1}{2}} (k_0 T)^{\frac{3}{2}}} \left[ \ln(1 + \gamma(x)) \right] - \frac{\gamma(x)}{1 + \gamma(x)}, \quad \gamma(x) = \frac{4 \chi m (k_0 T)^2}{3\pi \hbar^2 e^2 n_3} \frac{F_{\frac{3}{2}}(\eta_3)}{F_{\frac{1}{2}}(\eta_3)}$$

$$v_{ak3} = \frac{E_1^2 (2mk_0T)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\rho\hbar^4 v_0^2} x^{\frac{1}{2}}, \quad v_{pz3} = \frac{e^2 \beta^2 (2mk_0T)^{\frac{1}{2}}}{2\pi\rho\hbar^2 v_0^2} x^{-\frac{1}{2}} \quad (4)$$

Burada

$$F_r(\eta_3) = \int_0^\infty x^r dx \frac{e^{x-\eta_3}}{(e^{x-\eta_3}+1)^2} \quad (5)$$

– birparametrlı Fermi inteqralı,  $v_0$  – səsin kristalda sürəti,  $\chi$  – statik dielektrik nüfuzluğu,  $n_{i3}$  – həcmi kristallarda ionların konsentrasiyası,  $E_1$  – deformasiya potensialının sabiti,  $\beta = 4\pi\sqrt{0.8} e_{14}/\chi$  ( $e_{14}$  – pyezopotensialın parametridir) [7].

### **II b) 2-ölçülü halda termoehq**

Temperatur qradiyentinin 2-ölçülü elektron qazı müstəvisində yaradıldığı hala baxırıq. Modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialını aşağıdakı şəkildə yazmaq olar:

$$U(z) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \tanh^2 \alpha z. \quad (6)$$

Burada  $z$  – kvant təbəqəsinin eni istiqamətində koordinat,  $\alpha$  – potensialın parametridir. GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvant çuxuru üçün ədədi hesablamalarda biz  $\alpha = 3 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$  qiymətindən istifadə edəcəyik[8].

2-ölçülü halda (1) ifadəsinə daxil olan  $J_0$  və  $J_1$  inteqralları aşağıdakı şəkildədir[5]:

$$J_i^{(2)} = \frac{e^2 k_0 T}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty x dx \frac{e^{x-\eta_2}}{(e^{x-\eta_2}+1)^2} \tau_2(x) (x - \eta)^i; \quad i = 0, 1 \quad (7)$$

Burada  $\tau_2(x)$  – 2-ölçülü halda elektronların relaksasiya müddəti,  $\eta_2$  isə həmin halda gətirilmiş kimyəvi potensialdır. Pöşl-Teller potensialı kvant çuxurunda elektronların gətirilmiş  $\eta_2$  kimyəvi potensialı [8] işində hesablanmışdır:

$$\eta_2 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2mk_0T} + \ln \left[ \exp \left( \frac{\pi \hbar^2 n_2}{mk_0T} \right) - 1 \right] \quad (8)$$

Burada  $n_2$  - elektronların 2-ölçülü konsentrasiyası (səth sıxlığı),  $\tau_2(x)$  - 2-ölçülü halda elektronların relaksasiya müddətidir [8]:  $\tau_2(x) = (v_{ak2} + v_{pz2} + v_{i2})^{-1}$ ,

$$v_{ak2} = \frac{4E_1^2 k_0 T \alpha m}{3\pi\rho\hbar^3 v_0^2} \int_0^1 \frac{t^2 dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}} \quad (9)$$

$$v_{pz2} = \frac{2k_0 T m e^2 \beta^2}{\pi \alpha \rho \hbar^3 v_0^2} \int_0^1 \frac{t^2 dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}} \int_0^\infty \frac{y^2 dy}{y^2 + \left(\frac{\pi k t}{\alpha}\right)^2} \text{csch}^2 y, \quad (10)$$

$$v_{i2} = \frac{4\pi e^4 m n_{i2} \alpha^2}{\chi^2 \hbar^3 k^2} \int_0^1 \frac{dt}{\epsilon^2(k,t)\sqrt{1-t^2}} \left[ \int_0^\infty e^{-2kzt} (1 - \tanh^2 \alpha z) dz \right]^2 \quad (11)$$

Bu ifadələrdə

$$\epsilon(k, t) = 1 + \frac{me^2}{\hbar^2 \chi kt} \left\{ 2 \left( \frac{kt}{\alpha} \right)^2 \Psi^{(1)} \left( -1 + \frac{kt}{\alpha} \right) - \frac{1 + \left( \frac{2kt}{\alpha} - 1 \right) \left( \frac{kt}{\alpha} \right)^2}{\left( \frac{kt}{\alpha} - 1 \right)^2} \right\} f_0 \left( \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \right) \quad (12)$$

– Pöşl-Teller potensialı yarımkeçirici kvant çuxurunda səpici potensialların ekranlaşmasını xarakterizə edən dielektrik funksiya [8],  $\Psi^{(1)}(z) = \frac{d^2}{dz^2} \ln \Gamma(z)$  – triqamma-funksiya,  $\Gamma(z)$  – qamma-funksiya,  $f_0 \left( \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \right)$  – ən aşağı enerjili halın ( $k = 0$ ) elektronlar tərəfindən tutulma ehtimalı,  $n_{i2}$  – ionların səth sıxlığıdır (2-ölçülü konsentrasiyadır).

### III. EKTRANLAŞMANIN 2-ÖLÇÜLÜ ELEKTRON QAZININ TERMOELEKTRİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİNƏ TƏSİRİ

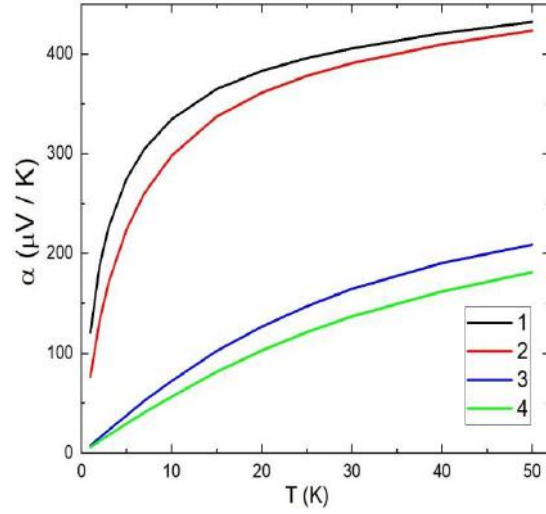
Modifikasiya olunmuş Pöşl-Teller potensialı yarımkeçirici kvant çuxurunda termoehtq-nin elektron hissəsi (yəni, elektronların fononlar tərəfindən sövqü nəzərə alınmayan şəraitdə termoehtq) səpici potensialların ekranlaşmasını nəzərə almaqla (1) və (7)-(12) tənliklərindən tapılır. Ekranlaşmanın nəzərə alınmadığı halda termoehtq də həmin tənliklərdən  $\epsilon(k, t) = 1$  yazmaqla hesablanır. Ekranlaşmanın termoehtq-nin temperaturdan asılılığına təsirini zəif və güclü cırılmaşma elektron qazı halında, yəni elektronların səth sıxlığının kiçik və böyük qiymətlərində tədqiq edək.

Ekranlaşma səpici potensialların elektronların nizamlı hərəkətinə təsirini azaltdığı üçün, aydındır ki, onun təsiri nəticəsində elektronların yüürlüklüyü artır. Əvvəlki işlərdən[8] məlumdur ki, ekranlaşma elektronların yüürlüklüyünə çox böyük təsir göstərir, güclü cırılmaşma şəraitində elektronların səth sıxlığının və temperaturun qiymətlərindən asılı olaraq ekranlaşma yüürlüklüyü 2,5-5 dəfə artırır. Zəif cırılmaşma halında (elektronların səth sıxlığının kiçik qiymətlərində) isə ekranlaşma nəticəsində yüürlüklüyün artımı az (5-30% tərtibində) olur.

Termoehtq-yə gəldikdə hesablama aparmadan ekranlaşmanın termoehtq-ni artırır-azaltığını söyləmək olmaz. Bu, ekranlaşmanın diffuzion cərəyana, yaxud termoelektrik cərəyana daha güclü təsir göstərməsindən asılıdır. GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvant çuxurları üçün aparılmış ədədi hesablamlar (yuxarıdakı ifadələrə xil olan parametrlərin qiyməti [7] işində verilmişdir) göstərir ki, elektronların istənilən cırılmaşma dərəcəsinə, yəni onların istənilən səth sıxlığında ekranlaşmanın təsiri ilə termoehtq azalır. Bu göstərir ki, ekranlaşma diffuzion cərəyana nisbətən termoelektrik cərəyanı daha çox artırır.

Şəkil 2-də ekranlaşmanın nəzərə alındığı və nəzərə alınmadığı halda termoehtq-nin temperaturdan asılılıqları verilmişdir. Hesablamlar elektronların zəif cırılmaşmasına uyğun gələn  $n = 10^{14} m^{-2}$  və güclü cırılmaşmaya uyğun gələn  $n = 2 \times 10^{15} m^{-2}$  səth sıxlıqlarında aparılmışdır. İonların səth sıxlığının dəyişməsi diffuzion və termoelektrik cərəyana təxminən eyni qədər təsir edir. Lakin bu amil çox az da olsa termoehtq-

yə təsir etdiyi üçün ədədi hesablamanın aparıldığı hər bir hal üçün ionların hesablamada istifadə olunan səth sıxlığı da göstərilmişdir. Qrafiklərdən görünür ki, 2-ölçülü elektron qazında ekranlaşmanın termoehtq-yə təsiri, yüürlüklüyə təsiri ilə müqayisədə, xeyli zəif olur. Güclü cırılmaşma halında ekranlaşmanın təsiri ilə termoehtq-nin azalması 15-30% qədər, cırılmaşmamış halda isə bir neçə faiz olur.



Şəkil 2. Ekranlaşmanın termoehtq-nin temperaturdan asılılığına təsiri. 1.2- $n=10^{10}$ ,  $n_i=2 \times 10^8$ , 3.4- $n=10^{11}$ ,  $n_i=5 \times 10^9$ , sm<sup>-2</sup>. 1 və 3 – ekranlaşmanın təsiri nəzərə alınmış, 2 və 4 – ekranlaşmanın təsiri nəzərə alınmayıb.

Şəkil 2-də ekranlaşmanın nəzərə alındığı və nəzərə alınmadığı halda termoehtq-nin temperaturdan asılılıqları verilmişdir. Hesablamlar elektronların zəif cırılmaşmasına uyğun gələn  $n = 10^{14} m^{-2}$  və güclü cırılmaşmaya uyğun gələn  $n = 2 \times 10^{15} m^{-2}$  səth sıxlıqlarında aparılmışdır. İonların səth sıxlığının dəyişməsi diffuzion və termoelektrik cərəyana təxminən eyni qədər təsir edir. Lakin bu amil çox az da olsa termoehtq-yə təsir etdiyi üçün ədədi hesablamanın aparıldığı hər bir hal üçün ionların hesablamada istifadə olunan səth sıxlığı da göstərilmişdir. Qrafiklərdən görünür ki, 2-ölçülü elektron qazında ekranlaşmanın termoehtq-yə təsiri, yüürlüklüyə təsiri ilə müqayisədə, xeyli zəif olur. Güclü cırılmaşma halında ekranlaşmanın təsiri ilə termoehtq-nin azalması 15-30% qədər, cırılmaşmamış halda isə bir neçə faiz olur.

### IV. 2- VƏ 3- ÖLÇÜLÜ ELEKTRON QAZINDA TERMOELEKTRİK HƏRƏKƏT QÜVVƏSİ: MÜQAYİSƏ

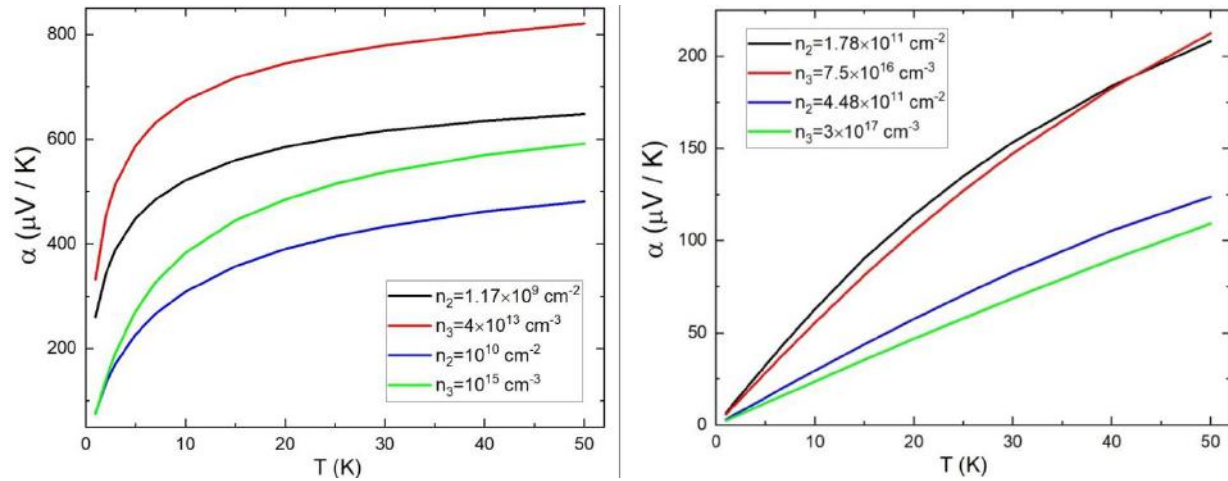
Burada biz müxtəlif temperaturalarda GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvant çuxurunda və GaAs 3-ölçülü

kristalında yaranan termoeq-ni müqayisə edəcəyik. Kvant çuxurunda termoeq (1) və (7)-(12) tənlıklarindən, 3-ölçülü halda isə (1)-(5) tənlıklarından hesablanır.

Termoeq-nin qiymətləri 2-ölçülü halda elektronların səth sıxlığından (2-ölçülü konsentrasiyadan), 3-ölçülü halda isə elektronların 3-ölçülü konsentrasiyasından asılıdır. Ona görə də kvant çuxurunda və 3-ölçülü halda yaranan termoeq-ni müqayisə edərkən  $n_2$  səth sıxlığı və  $n_3$  konsentrasiyanın arasında hansı münasibətin olduğunu nəzərə almalıyıq. Biz müqayisəni vahid həcmə düşən elektronların və ionların sayının hər iki halda eyni olması şərtində, yəni  $n_2^3 = n_3^2$  şərtində aparacağıq. Qeyd edək ki, 3-ölçülü

aşqar yarımkəçiricilərdə elektron və ionların konsentrasiyası bir-birindən az fərqlənir ( $n_3 = n_{i3}$ ), biz müqayisə apararkən 2-ölçülü halda da bu münasibəti ( $n_2 = n_{i2}$ ) qəbul edəcəyik.

Elektronların cırışmasının müxtəlif dərəcələrinə 3-ölçülü və 2-ölçülü halda yaranan termoeq-lər arasında fərq görmək üçün Şəkil 3-də nəticələr elektronların konsentrasiyasının  $n_3 = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  (bu halda  $n_2 = 1.17 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ );  $n_3 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  ( $n_2 = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ );  $n_3 = 7.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  ( $n_2 = 1.78 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) və  $n_3 = 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  ( $n_2 = 4.48 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) qiymətlərində verilmişdir.



Şəkil 3. 3-ölçülü və 2-ölçülü halda termoeq-nin temperaturdan asılılıq qrafikləri. Solda zəif cırışmış elektron qazında, sağda güclü cırışmış elektron qazında termoeq.

Şəkil 3-dən görüldüyü kimi zəif cırışmış və ya cırışmamış elektron qazı üçün termoeq 2-ölçülü hala nisbətən 3-ölçülü halda daha böyükdür. Cırışmamış halda bu fərq 25-30% olur. Cırışma dərəcəsinin orta qiymətlərində ( $\eta \cong 1 - 3$ ) 2- və 3-

ölçülü termoeq-lər təxminən eyni, güclü cırışmış elektron qazında isə 2-ölçülü haldakı termoeq daha böyükdür (15-25%).

[1] R. Fletcher, J.C. Maan, G. Weimann. Phys. Rev. B, 32, 1985, 8477-8479.  
 [2] R.Fletcher, J.J.Harris, C.T.Foxon, M.Tsaousidou, P.N.Butcher. Phys.Rev.B, 50, 1994, 14991-14998.  
 [3] S.K.Lyo. Phys.Rev.B, 38, 1988, 6345-6347.  
 [4] F.M.Hashimzade, M.M.Babayev, B.H.Mehdiyev and Kh.A.Hasanov. Journal of Physics: Conference Series, 245, 2010, 012015.  
 [5] M.M.Babayev, X.B.Sultanova. Kvant çuxurlarında ikiölçülü elektron qazının

termoelektrik hərəkət qüvvəsi. Fizika, XXVII - Az (2021), 23-26.  
 [6] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Москва, Наука, 1985, 318 стр.  
 [7] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Москва, Наука, 1984, 351 стр.  
 [8] М.М. Babayev, Kh.B. Sultanova, N.B.Mustafayev. Journal of Physics, 56 (2018), 2977-2983.

**M.M. Babayev, Kh.B. Sultanova**

**THERMOPOWER IN SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS AND IN BULK CRYSTALS**

The effect of screening on the thermopower in a semiconductor quantum well with a modified Pöschl-Teller potential has been studied. The numerical calculations in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells show that for any degree of electron degeneracy, i.e. at any surface electron density, screening decreases thermopower. This decrease is small (several percent) in

weakly degenerated electron gas, and is 15-30% in strongly degenerated electron gas. The results obtained for the thermopower in a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells are compared with the thermopower in a bulk GaAs crystal.

**М.М. Бабаев, Х.Б. Султанова**

**ТЕРМОЭДС В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ И В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Исследовано влияние экранирования потенциалов рассеяния на термоэдс в полупроводниковой квантовой яме с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера. Численные расчеты в квантовых ямах GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As показывают, что при любой степени вырождения, т.е. при любой поверхностной плотности электронов, экранирование уменьшает термоэдс. Это уменьшение незначительно (несколько процентов) в слабо вырожденном электронном газе и составляет 15—30% в сильно вырожденном электронном газе. Проведено сравнение результатов для термоэдс в квантовой яме GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As и в объемных кристаллах GaAs.