Влияние глубины зоны тяжелых дырок на термоэлектрические характеристики сильно легированного p-PbTe

Дмитриев А.В.

Физический факультет, Московский государственный университет, 119991, Москва, Ленинские горы

DOI 10.34077/Semicond2019-50

Твердотельные термоэлектрические преобразователи имеют целый ряд преимуществ перед традиционными, в числе которых простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надёжность, возможность уменьшения размеров устройства без потери эффективности. Они могут быть использованы также и для обратного преобразования и применяются в экологически чистых устройствах охлаждения. Хотя их эффективность в настоящее время и уступает традиционным устройствам генерации электрической энергии, тем не менее область их применения весьма широка [1].

Для высокотемпературных термоэлектрических применений одним из лучших материалов является теллурид свинца и сплавы на его основе. Их термоэлектрическая эффективность ZT обыкновенно достигает 0.7 при $T = 700\text{—}800$ К [1]. В последнее время появились указания на заметное возрастание ZT теллурида свинца p-типа при повышении концентрации акцепторной примеси, причём выяснилось, что большую роль в этом возрастании играют возникающие тяжёлые дырки в глубокой Σ -зоне [2]. Поскольку глубина этой зоны определена не вполне точно, имеет смысл провести расчёты при разных её значениях.

В настоящей работе теоретически исследованы термоэлектрические свойства p-PbTe при высоком уровне акцепторного легирования $5 \cdot 10^{19}\text{—}4 \cdot 10^{20}$ см⁻³ в диапазоне температуры от 300 до 900 К и глубине зоны тяжелых дырок от 0.36 до 0.7 эВ. В расчетах использована трёхзонная непараболическая модель электронного энергетического спектра PbTe [3,4], включающая зоны легких электронов и дырок в L-точках зоны Бриллюэна и зону тяжелых дырок с экстремумами в Σ -точках.

Рассчитан полный комплект термоэлектрических величин p-PbTe в указанных диапазонах изменения параметров. Величина термоэлектрической эффективности Z оказалась весьма чувствительна к уровню легирования, увеличиваясь в 1.5 раза при возрастании концентрации примеси с $1 \cdot 10^{19}$ до $5 \cdot 10^{19}$ см⁻³, причем наибольшее значение Z отвечает $N_a = 1 \cdot 10^{20} - 2 \cdot 10^{20}$ см⁻³.

Изменение глубины зоны тяжелых дырок приводит к заметному смещению положения максимума Z по оси температуры без существенного изменения величины Z в максимуме. Температура, при которой наблюдается максимум Z , близко коррелирует с той, при которой вершина зоны легких дырок в своём температурном движении пересекает уровень Ферми. Максимальная найденная величина ZT равняется 1.64. При глубине зоны тяжелых дырок 0.5 эВ наши расчеты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [5].

[1] А.В. Дмитриев, И.П. Звягин, УФН **180**, 821 (2010).

[2] N.I.Babenko, A.V.Dmitriev, J. Appl. Phys. **122**, 065701 (2017).

[3] A. V. Dmitriev, E. S. Tkacheva, J. Electron. Mater. **43**, 1280 (2014).

[4] А.В. Дмитриев, Е.С. Ткачёва, Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2014, №3, с. 38.

[5] J. Androulakis et al., Phys. Rev. B. **82**, 115209 (2010).