

PACS: 66.35.+a; 74.25.fg

ISSN 1729-4428 (Print)
ISSN 2309-8589 (Online)

О.М. Возняк, І.В. Горічок, Л.І. Никируй

Модель розрахунку термоелектричних властивостей наноструктурованих матеріалів

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ, Україна,
lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua

Для моделі бар'єр-яма-бар'єр наноструктурованого термоелектричного матеріалу, яка базується на потенціалах Гаусса, Пешль-Теллера та прямокутних бар'єрах і ямі, виконано розрахунки термоелектричних характеристик. Для квантових структур бар'єр-яма-бар'єр на базі потенціалів Гаусса і Пешль-Теллера розроблена програма для розрахунку термоелектричних характеристик в основі якої Thomas algorithm для розрахунку коефіцієнта проходження частинок через квантову структуру та чисельного інтегрування виразів для питомої електропровідності та коефіцієнта термое.р.с. із відповідною графічною ілюстрацією одержаних результатів. Програма розрахунків реалізована на платформі комп'ютерної математики Maple. Для квантової структури на базі прямокутних потенціалів із застосуванням методики квантового імпедансу, одержано вираз для коефіцієнта проходження частинок через таку структуру та застосовано його для розрахунку засобами символічної математики пакету Maple питомої провідності, коефіцієнта Зеебека та фактора потужності. Враховано вплив резонансного тунелювання частинок через запропоновану трибар'єрну структуру на її термоелектричні характеристики. Подано аналіз одержаних результатів розрахунків.

Ключові слова: квантовий тунельний механізм термоелектричних явищ, модель наноструктурованого матеріалу, коефіцієнт Зеебека, коефіцієнт потужності.

Received 19 January 2025; Accepted 26 June 2025.

Вступ

Відтоді як стало зрозумілим, що при включенні бар'єрів в об'ємний матеріал, властивості електронного транспорту можуть бути різко змінені, у ряді робіт було досліджено роль "енергетичної фільтрації" носіїв [5] у термоелектричних явищах. Було побудовано теорію квантово-тунельного механізму термоелектричних явищ для декількох квантових систем на основі надграток з квантовими ямами, квантовими точками та для інших термотунельних об'єктів [1] – [4].

Крім того, поява нової технології, яка ґрунтується на отриманні термоелектричного матеріалу розмірами 10–20 нм із наступним його пресуванням (див., наприклад, [6]) забезпечує його нанорозмірну структурованість. Тобто, масивний матеріал утворений нанорозмірними зернами із відповідними

міжзеренними проміжками. При таких розмірах зерно і міжзеренний простір можна розглядати як квантово-механічну систему, яка включає квантову яму, оточену двома бар'єрами. У таких системах реалізується квантовий транспорт тунельного типу. Така модель враховує і можливість резонансного проходження квантової системи бар'єр-яма-бар'єр.

I. Модель наноструктурованого термоелектричного матеріалу

Як вже було зазначено наявність бар'єрів суттєво змінює термоелектричні характеристики матеріалу. Якщо ж мова йде про наноструктурований матеріал, то й саме нанозерно буде описуватися квантовими законами і у якому можуть існувати зв'язані стани, наявність яких спричинятиме існування резонансних

процесів при проходженні носіїв через нього. Задаючи форму бар'єрів та ями різними функціями можна одержати кілька корисних моделей наноструктурованого матеріалу. Зокрема, задаючи форму ями з допомогою потенціала Гаусса можна одержати модель яка описує квантову точку оточену двома бар'єрами. Якщо ж як бар'єри так і яму вважати прямокутними, то можна одержати точнорозв'язану модель наноструктурованого матеріалу. Ряд переваг можна одержати для моделі, що описується потенціалом Пешль-Теллера, зважаючи на те, що при певних параметрах такий потенціал стає безвідбивним. Графічне представлення однієї із таких моделей наведено на рисунку 1, на якому зображено квантово-механічну модель побудовану на функції (4). Тут відстані визначені у відносних одиницях $x = x/a_0$, де $a_0 = 1 \text{ nm}$, а V_0 – параметр потенціалу пов'язаний із висотою потенціального бар'єру також визначений у відносних одиницях $V_0 = U_0/E_0$, де $E_0 = \hbar^2/2ma_0^2$, ζ – півширина функції Гаусса визначена у відносних одиницях $\zeta = w/a_0$.

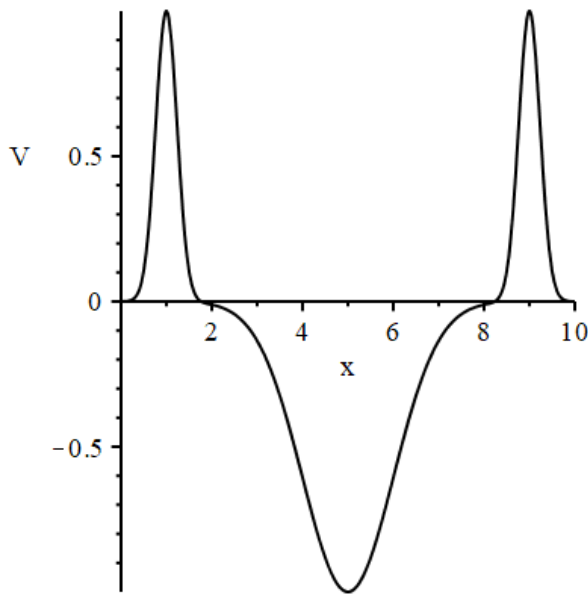


Рис. 1. Потенціально-енергетична діаграма нанозерна із міжзернними бар'єрами, що ґрунтується на функції Гаусса: висота бар'єрів та глибина ями складають одну відносну одиницю, півширина бар'єрів $\zeta = 1/3$, півширина ями $\zeta = 1$.

II. Основні співвідношення для квантового транспорту

Кінетичні явища при проходженні носіїв через квантову систему бар'єр-яма-бар'єр описується квантово-тунельним механізмом явищ переносу. Відповідно до ідей теорії квантового переносу Ландауера [8], [9] густина тунельного струму у випадку, коли на систему накладено зовнішнє електричне поле і градієнт температури задається виразом

$$j = \frac{1}{4\pi^3} \int e v_x \tau(E_x) \left[f_0\left(\frac{E-\mu}{k_0 T}\right) - f_0\left(\frac{E-(\mu+\Delta V)}{k_0 T}\right) \right] d^3 k \quad (1)$$

де $f_0\left(\frac{E-\mu}{k_0 T}\right) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} + 1}$ – функцією розподілу

Фермі-Дірака, $\tau(E)$ – коефіцієнт проходження квантової структури, e – елементарний заряд, v_x – проекція швидкості на напрям Ox , μ – хімічний потенціал носіїв, ΔV – різниця потенціалів прикладеного до зразка поля, T – абсолютна температура, а k_0 – стала Больцмана.

Для типових значень різниць потенціалів прикладених до зразка та струмів, що проходять через нього при розмірах наночастинок (10-20) nm спад напруги на одному зерні складатиме від 10^{-6} В до $\sim 10^{-4}$ В. При різниці температур на зразку у 100 K різниця температур, що припадає на одне нанозерно складатиме близько 10^{-3} K, а $k_0 T \sim 10^{-7}$ еВ. Тому, враховуючи зазначене та застосовуючи застосовуючи розклад у ряд за малим параметром і обмежившись лінійними внесками, для густини струму одержимо

$$j = \frac{me}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE_x \tau(E_x) \int_0^{E_x} \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \left(e\Delta V + \frac{E-\mu}{T} \Delta T \right) dE$$

У цій формулі, E_x – кінетична енергія руху носія вздовж осі Ox , а $E = E_x + E_\perp$, де $E_\perp$ – відповідає енергії, яка враховує ступені руху у площині Y, Z .

Рівняння для густини потоку тепла j_q у тому ж наближенні матиме вигляд

$$j = \frac{4\pi me}{(2\pi \hbar)^3} \int_0^\infty dE_x \tau(E_x) \int_0^{E_x} (E - \mu) \frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \left(e\Delta V + \frac{E-\mu}{T} \Delta T \right) dE.$$

Розрахункові формули для питомої електропровідності та коефіцієнта термое.р.с набувають вигляду

$$\sigma = \sigma_0 \int_0^{E_x} \tau(E_x) f_0\left(\frac{E-\mu}{k_0 T}\right) dE_x \quad (2)$$

де $\sigma_0 = \frac{me^4 a E_0}{4\pi^2 \hbar^3}$ і складає величину близьку до $2000 \text{ (Ом} \cdot \text{м)}^{-1}$.

$$S = S_0 \frac{\int_0^{E_x} \tau(E_x) \left[\left(\frac{E_x - \mu}{k_0 T} \right) f_0\left(\frac{E-\mu}{k_0 T}\right) + \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - \mu}{k_0 T}\right)\right) \right] dE_x}{\int_0^{E_x} \tau(E_x) f_0\left(\frac{E-\mu}{k_0 T}\right) dE_x} \quad (3)$$

де $S = \frac{k_0}{e}$ є величиною близькою до 100 мкВ/К.

Вирази для σ і S містять коефіцієнт проходження частинки через бар'єрну структуру $\tau(E)$. Для складних потенціальних профілів, як у запропонованому нами випадку, вираз для $\tau(E)$, здебільшого, можна одержати лише чисельним

методом.

Обчислення виразів для питомої електропровідності та коефіцієнта термое.р.с реалізовуватимемо у відносних одиницях. Тому для зручності обчислень введемо відносні величини, зокрема відстані визначатимемо за співвідношенням $\bar{l} = \frac{l}{a_0}$, де $a_0 = 1$ нм. За одиницю вимірювання енергії вибираємо величину $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = 0.0381$ еВ, тобто, безрозмірна енергія є такою $\bar{E} = \frac{E}{E_0}$, а безрозмірна потенціальна енергія $\bar{V} = \frac{V}{E_0}$. Безрозмірне хвильове число визначиться співвідношенням $\frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{E}{E_0}}$.

III. Моделювання наноструктурованого термоелектричного матеріалу

3.1. Модель наноструктурованого термоелектричного матеріалу на основі потенціалу Гауса.

При моделюванні наноструктурованого матеріалу, нанозерно може бути описане за допомогою гаусівського потенціалу $U(x) = U_0 \exp(-\frac{x^2}{w^2})$ [7], що може призводити до утворення зв'язаних станів. Тому ми використаємо цей потенціал для визначення як потенціального бар'єра, так і квантової ями. Відтак, потенціал наноструктури описуватиметься функцією

$$V(x) = V_0 \exp(-9(x-1)^2) - \exp(-(x-5)^2) + V_0 \exp(-9(x-9)^2) \quad (4)$$

який описує бар'єр гаусового типу з півшириною в одну відносну одиницю з центром у точці $x/x_0 = 1$, квантову яму гаусового типу з шириною в шість відносних одиниць з центром у точці $x/x_0 = 5$, та бар'єр гаусового типу з півшириною в одну відносну одиницю з центром у точці $x/x_0 = 9$. Тут $x_0 = 1$ нм, а V_0 – параметр потенціалу, пов'язаний з висотою потенційного бар'єру, який також визначається у відносних одиницях як U_0/E_0 . Для числового розв'язку рівняння Шредінгера переформулюється у вигляді так званих скінченних різниць

$$\frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{\Delta^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_n) \psi_n = 0, \quad (n = 1, 2, \dots, N-1) \quad (5)$$

де Δ – крок дискретизації, n – номер вузла сітки, V_n – значення потенціальної енергії, ψ_n – значення потенціальної енергії.

Або у збезрозміреному вигляді

$$\psi_{n-1} - u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0, \quad (n = 1, 2, \dots, N-1) \quad (6)$$

де $u_n = \varepsilon - v_n - 2$, $v_n = \frac{V_n}{E_0}$, $\varepsilon = \frac{E}{E_0}$.

До різницевих рівнянь (6) застосовано процедуру їх наближеного розв'язку, зокрема, Thomas algorithm [12].

Якщо $V(x)$ не рівне нулю на проміжку $[0, a]$ і, якщо падаючий потік нормований на одиницю, то на проміжку $(-\infty; 0]$

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}$$

а при $x > a$ $\psi_3(x) = te^{ik(x-a)}$.

З умов неперервності хвильової функції та її похідної у точці $x = 0$ приходимо до такої граничної умови

$$\psi'(0) + ik(0) = 2ik. \quad (7)$$

Так само на правому краї інтервалу

$$\psi'(a) - ik(a) = 0. \quad (8)$$

Шредінгера і одержання граничних умов крайової задачі, вводять "фіктивний" вузол сітки x_{-1} та апроксимують похідну на лівому краї інтервалу $\psi'(0)$ ітроточковим виразом

$$\psi'(0) = \frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2\Delta^2}.$$

Використавши вираз для $\psi'(0)$ приходимо до такої граничної умови на лівому краї інтервалу

$$\psi_1 + (0,5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta. \quad (9)$$

Так само увівши інший "фіктивний" вузол x_{N+1} знаходимо другу граничну умову

$$\psi_{N+1} + (0,5u_N + ik\Delta)\psi_N = 0. \quad (10)$$

Тепер система рівнянь, що містить різниці рівняння (6) та граничні умови (9) і (10), набуває вигляду

$$\psi_{n-1} + u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0,$$

$$\psi_1 + (0,5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta,$$

$$\psi_{N+1} + (0,5u_N + ik\Delta)\psi_N = 0.$$

Розв'язок рівняння (6) шукатимемо у вигляді

$$\psi_{n+1} = R_n \psi_n. \quad (11)$$

Для коефіцієнтів R_n знаходимо рекурентне співвідношення

$$R_{n-1} = \frac{1}{R_n + u_n}. \quad (12)$$

Для R_n гранична умова на правій границі інтервалу має вигляд

$$R_{N-1} = \frac{1}{0.5 u_N + ik\Delta}. \quad (13)$$

Тепер починаючи із R_{N-1} вже визначається співвідношенням (13) з допомогою рекурентного співвідношення (12), шукатимемо R_{N-2} і т.д., рухаючись від $(N-1)$ - вузла до вузла 0, послідовно обчислюючи $R_{N-2}, R_{N-3} \dots R_1, R_0$, знайдемо всі N значень R_n ; ($n = 0; 1; \dots; N$).

Використовуючи вираз для R_0 , визначимо хвильову функцію ψ_0

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + 0.5u_0 + ik\Delta}. \quad (14)$$

Тепер рухаючись у зворотному напрямку від вузла 0 до $(N-1)$ - вузла за допомогою (6) послідовно знайдемо хвильову функцію у всіх внутрішніх вузлах сітки $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$. Отже, алгоритм прогону полягає у тому, що ми використовуємо значення R_{N-1} і за формулою (13) обчислюємо коефіцієнти R_n ($n = N-2; N-3, \dots, 0$), а потім використовуємо R_0 і за формулою $\psi_n = R_{n-1} \psi_{n-1}$ обчислюємо хвильові функції ψ_n ($n = 1; 2; \dots, N$).

Алгоритм методу прогону (Thomas algorithm) використовується для чисельної реалізації знаходження коефіцієнта проходження $\tau(E)$ носіїв через квантову трибар'єрну структуру і базується на розрахункових формулах для коефіцієнтів R_n (12) при їх послідовному застосуванні від $(N-1)$ -го до нульового вузла і використання співвідношення (11) для реалізації зворотного рекурсивного процесу. Знайдені значення ψ_N для різних значень параметра ϵ у інтервалі від 0 до 10 відносних одиниць використаємо для одержання коефіцієнта проходження за співвідношенням

$$\tau(E) = |\psi_N|^2. \quad (15)$$

Одержаний, у такий спосіб, масив для $\tau(E)$

$$R = \left(2 \frac{k_1^2 - k_0^2}{k_0 k_1} A_1(a) + \frac{k_2^2 - k_0^2}{k_0 k_2} A_2(b) + \frac{k_1^4 - k_0^2 k_2^2}{k_0 k_1^2 k_2} A_1^2(a) A_2(b) \right)^2 / \left(4 \left(1 - A_1^2 - \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} A_1^2(a) A_2(b) \right)^2 + \left(2 \frac{k_1^2 + k_0^2}{k_0 k_1} A_1(a) + \frac{k_2^2 + k_0^2}{k_0 k_2} A_2(b) - \frac{k_1^4 + k_0^2 k_2^2}{k_0 k_1^2 k_2} A_1^2(a) A_2(b) \right)^2 \right),$$

де $A_1(a) = \tan(k_1 a)$, $A_2(b) = \tan(k_2 b)$.

Вираз для коефіцієнта проходження можна знайти у такий спосіб

$$\tau = 1 - R.$$

Використовуючи знайдений вираз для $\tau(E)$, засобами символічної математики пакету Maple, реалізовано обчислення питомої електропровідності σ , коефіцієнта Зеебека S і фактора потужності $P = \sigma S^2$ як функції від температури і які детально висвітлені у роботі [15].

використовується для чисельного розрахунку питомої електропровідності та коефіцієнта Зеебека за співвідношеннями (2) і (3) і фактора потужності $P = \sigma S^2$.

Обидва етапи алгоритма реалізовано у вигляді однієї програми у пакеті комп'ютерної математики Maple, які детально висвітлені у [13].

Графічна ілюстрація результатів розрахунків для бар'єрів висотою у одну відносну одиницю, $V/E_0 = 1$ та шириною $a/a_0 = 1$, і.е., тобто у одну відносну одиницю і ями такої ж глибини та шириною $b/a_0 = 6$, шість відносних одиниць наведено на рисунках 2, 3 і 4. По осі ординат зображено питому провідність визначену у відносних одиницях σ/σ_0 коефіцієнт Зеебека також визначений у відносних одиницях S/S_0 , та фактор потужності $\sigma S^2/(\sigma_0 S_0^2)$.

3.2. Точно розв'язувана модель для розрахунку термоелектричних характеристик наноструктурованого матеріалу.

Для розглянутої задачі існує одна точнорозв'язувана модель, якою передбачається існування дох прямокутних потенціальних бар'єрів, шириною співмірною із товщиною міжзеренного проміжку і прямокутної потенціальної ями шириною співрозмірною із розміром зерна. Відповідний потенціал можна записати у такому вигляді

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & 0 \leq x \leq a, \\ -1, & 0 \leq x \leq a+b, \\ V_0, & a+b \leq x \leq a+b+a, \\ 0, & x > a+b+a. \end{cases}$$

Для одержання точного виразу для коефіцієнта проходження можна використати метод квантового імпедансу [14].

Коефіцієнт відбивання для квантової структури прямокутні бар'єряма-бар'єр буде

Графічне представлення результатів розрахунків для прямокутних потенціальних бар'єрів висотою у одну відносну одиницю, $V/E_0 = 1$ та шириною у одну відносну одиницю a/a_0 і прямокутної потенціальної ями такої ж глибини та шириною $b/a_0 = 8$ відносних одиниць наведено на рисунках 5, 6 і 7. Як і у випадку, що базується на потенціалі Гаусса по ординат зображено питому провідність визначену у відносних одиницях σ/σ_0 коефіцієнт Зеебека визначений у відносних одиницях S/S_0 та фактор потужності $P = \sigma S^2/(\sigma_0 S_0^2)$.

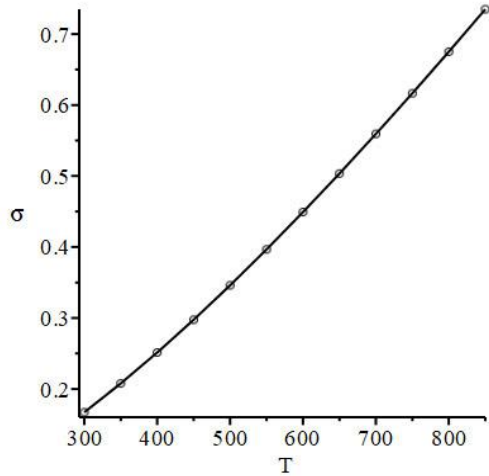


Рис. 2. Температурна залежність питомої провідності σ для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Гаусса.

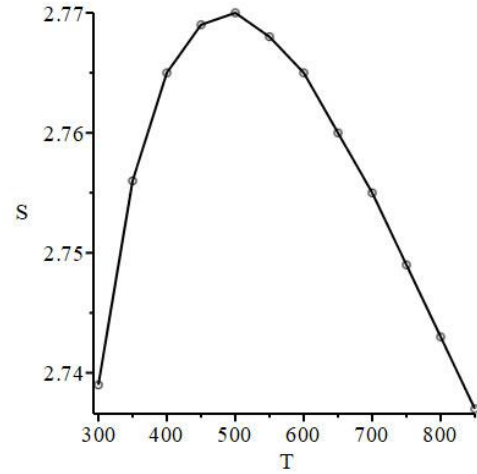


Рис. 3. Температурна залежність коефіцієнта Зеебека S для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Гаусса.

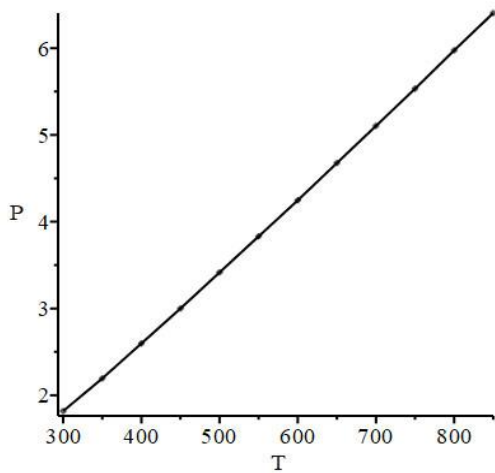


Рис. 4. Температурна залежність фактора потужності $P = \sigma S^2 f$ для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Гаусса.

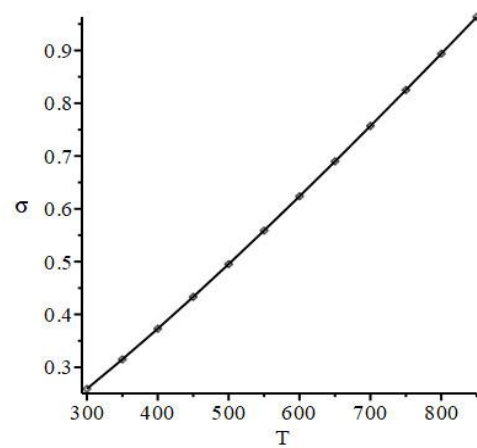


Рис. 5. Температурна залежність питомої провідності σ для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі прямокутних потенціалів.

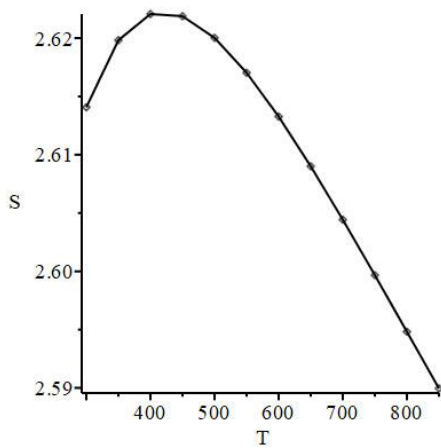


Рис. 6. Температурна залежність коефіцієнта Зеебека S для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі прямокутних потенціалів.

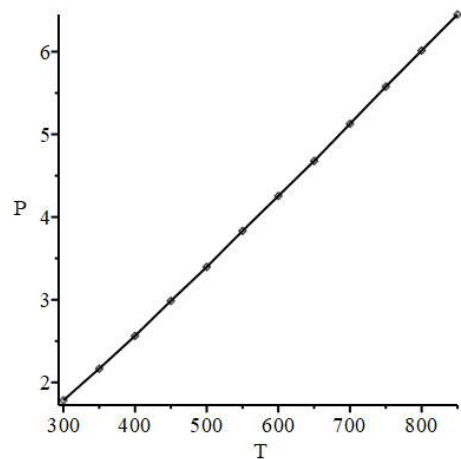


Рис. 7. Температурна залежність фактора потужності $P = \sigma S^2$ для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі прямокутних потенціалів.

3.3. Модель наноструктурованого термоелектричного матеріалу на основі потенціалу Пошля-Теллера.

Розглянемо ще один приклад структури бар'єр-яма-бар'єр, на цей раз, на основі потенціалу Пешль-Теллера $V(x) = V_0/\cosh^2(ax)$. Цей потенціал за формою нагадує потенціал Гаусса, але має при цьому ряд цікавих особливостей. Зокрема, як для потенціального бар'єра так і для ями для заданого потенціалу відомі аналітичні вирази для коефіцієнтів проходження $\tau(E)$, а при певних значеннях його параметрів потенціал Пешль-Теллера стає безвідбівним. Тепер потенціал наноструктури описуватиметься функцією

$$V(x) = \frac{1}{\cosh(3(x-1))^2} - \frac{1}{\cosh(x-5)^2} + \frac{1}{\cosh(3(x-9))^2}. \quad (17)$$

яка описує бар'єр пешль-теллерівського типу півшириною у одну відносну одиницю центрований у точці $x/x_0 = 1$, квантову яму також пешль-теллерівського типу шириною у шість відносних одиниць центрованою у точці $x/x_0 = 5$, та бар'єр пешль-теллерівського типу півшириною у одну відносних одиниць центрований у точці $x/x_0 = 9$. Висота потенціальних бар'єрів і глибина потенціальної ями однакові і рівні одній відносній

одиниці. Алгоритм розрахунків коефіцієнта проходження, питомої провідності, коефіцієнта Зеебека та фактора потужності реалізовано програмою, яка використовувалась при відповідних розрахунках для квантової структури бар'єр-яма-бар'єр побудованій на базі потенціала Гаусса. Графічна ілюстрація результатів розрахунків для бар'єрів висотою у одну відносну одиницю, та півшириною $a/a_0 = 1$, i.e., тобто у одну відносну одиницю і ями такої ж глибини та шириною $b/a_0 = 6$, у шість відносних одиниць наведено на рисунках 8, 9 і 10.

IV. Аналіз результатів розрахунків

Із аналізу результатів розрахунків для всіх трьох типів моделей квантових структур бар'єр-яма-бар'єр випливає, що в усіх випадках величини відносного коефіцієнта Зеебека є близькими. Відмінність між ними не перевищує 15 відсотків. Тобто наявність бар'єрів та ями має принциповий характер для зростання коефіцієнта термоерс, а зміна їх форми не призводить до його суттєвих змін.

За допомогою розробленої програми проведено дослідження температурних залежностей питомої електропровідності σ , коефіцієнта Зеебека S та

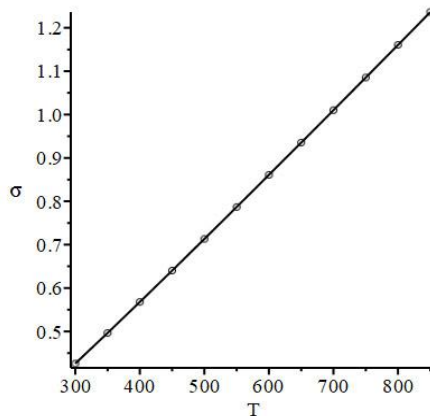


Fig. 8. Температурна залежність питомої провідності σ для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Пешль-Теллера.

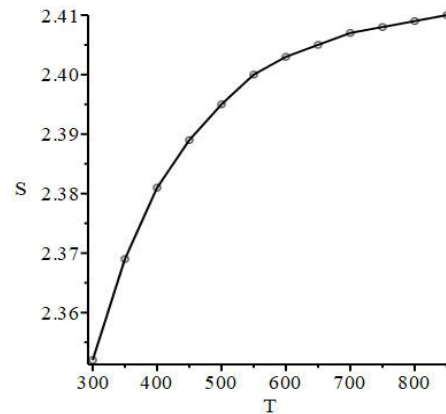


Fig. 9. Температурна залежність коефіцієнта Зеебека S для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Пешль-Теллера.

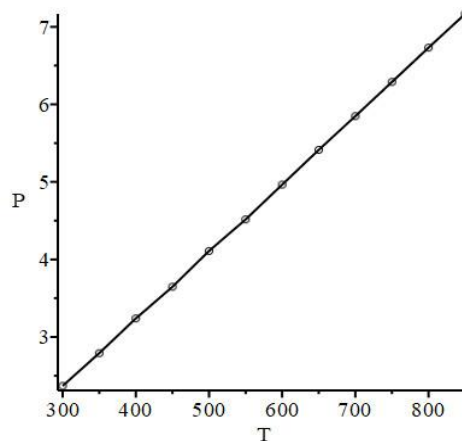


Fig. 10. Температурна залежність фактора потужності σS^2 для структури бар'єр-яма-бар'єр на основі потенціалу Пешль-Теллера.

фактора потужності $P = \sigma S^2$ від висоти міжзеренних бар'єрів та відстані між ними, тобто розмірів нанозерна.

Розрахунки показали, що при збільшенні висоти бар'єра питома провідність суттєво зменшується, зокрема при зростанні висоти бар'єра удвічі зменшення питомої провідності також є близькою до двох. Подібну поведінку виявляє і залежність питомої провідності від ширини бар'єра.

Із графіків наведених на рисунках 11 і 12 видно, що як при зростанні висоти бар'єра удвічі, так і приблизно на стільки ж його напівширини, тобто від ~ 0.3 до ~ 0.7 коефіцієнт Зеебека зростає приблизно на 20 відсотків.

Разом з тим зміна відстані між бар'єрами, тобто ширина ями, слабовпливає на термоелектричні характеристики запропонованої квантової структури. На рисунку 13 зображено графік залежності коефіцієнта проходження від енергії налітаючої частинки $\tau(E)$, на якому спостерігається щонайменше шість резонансних максимумів. Разом з тим розрахунки власних значень енергії у згаданій структурі з допомогою розробленої програми, яка

визначає власні значення шляхом діагоналізації матриці утвореної із коефіцієнтів при значеннях хвильової функції у вузлах сітки дає лише три значення. Також відповідність між резонансними енергіями і енергіями зв'язаних станів – неповна. Зазначена невідповідність підтверджує той факт, що кількість резонансних енергій і кількість стаціонарних станів у квантовій ямі не взаємно однозначно обумовлені.

Як видно із графічного представлення результатів розрахунків температурної залежності коефіцієнта Зеебека S для чотирьох різних ширин потенціальної ями b , зокрема для $b = 8, b = 6, b = 4$ та $b = 2$, зміна коефіцієнта Зеебека при $b = 8$ коли $\tau(E)$ має шість резонансних максимумів до випадку коли резонансні стани взагалі відсутні при $b = 2$ не перевищує і 4 відсотків. Така поведінка коефіцієнта Зеебека, очевидно, пов'язана із тим фактом, що функція $\tau(E)$ у виразах для провідності та термо е.р.с. входить у інтеграл. Тобто наявність резонансного тунелювання мало змінює як коефіцієнт Зеебека так і фактор потужності наноструктурованого матеріалу.

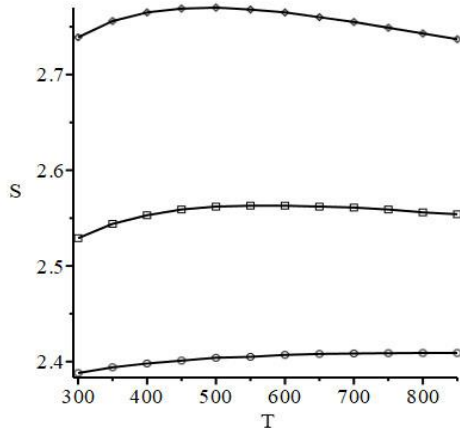


Рис. 11. Температурна залежність коефіцієнта Зеебека від висоти бар'єра: "○" – для $V_0 = 1$, "□" – for $V_0 = 1.5$, "◇" – for $V_0 = 2$.

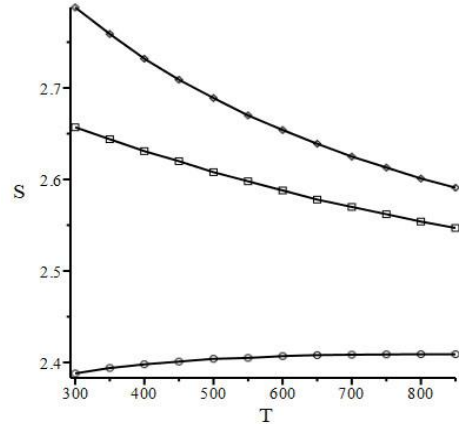


Рис. 12. Температурна залежність коефіцієнта Зеебека від ширини бар'єра: "○" – для напівширини $1/3$, "□" – для напівширини 0.5 , "◇" – для напівширини $1/\sqrt{2}$.

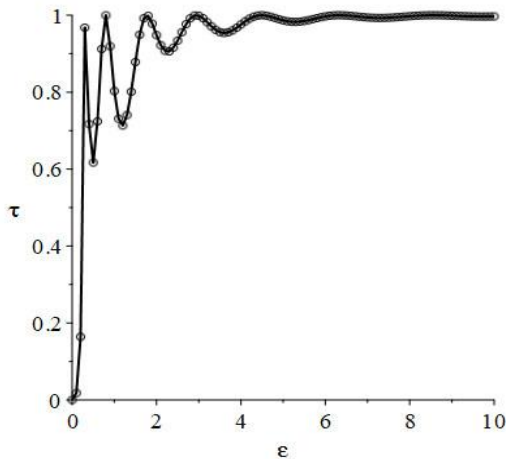


Рис. 13. Коефіцієнт проходження для структури бар'єр-яма-бар'єр побудованої на основі потенціалу Пешль-Теллера при ширині ями у шість відносних одиниць.

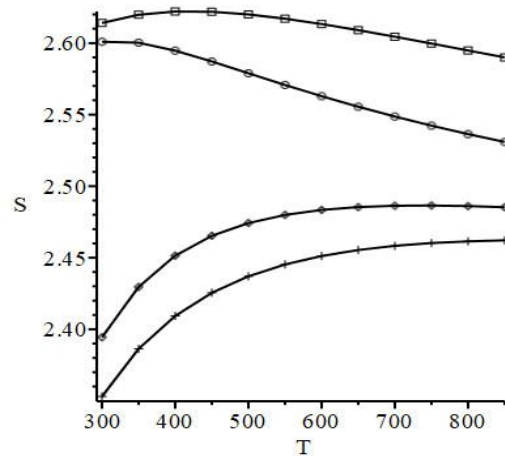


Рис. 14. Термо е.р.с. трибар'єрної структури як функція від температури для ширин ями b : $b = 2$ – "○", $b = 4$ – "◇", $b = 6$ – "+", $b = 8$ – "□".

Таблиця 1.

Порівняння результатів чисельного розрахунку коефіцієнта Зеебека для моделі на основі потенціалу Пешль-Теллера – SPT із результатами розрахунку за допомогою апроксимації $\tau(E) = \tau_1(E) \cdot \tau_2(E) \cdot \tau_3(E) - S_A$ від температури T .

1	2	3	4	5	6	7	8
TK	300	350	450	600	700	800	900
SA	2:24	2:28	2:31	2:33	2:33	2:32	2:31
$SP T$	2:35	2:37	2:39	2:4	2:41	2:41	2:31

Зазначимо, що знайдені значення термоелектричних характеристик та їх поведінка при зміні температури та параметрів квантової структури узгоджуються із результатами одержаними іншими авторами, зокрема [3], [7], [10], [11].

Для моделі, що описується потенціалом Пешль-Теллера як для бар'єра так і для ями відомі аналітичні вирази для коефіцієнтів проходження $\tau(E)$ [16]. Зокрема коефіцієнт проходження через бар'єр

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{U_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{a}\right)}.$$

за умови $\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2} < 1$, задається виразом

$$\tau(E) = \frac{\sinh^2(\pi ka)}{\sinh^2(\pi ka) + \cosh^2\left(\pi \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{2ma^2U_0}{\hbar^2}}\right)},$$

за умови $\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2} > 1$, виразом

$$\tau(E) = \frac{\sinh^2(\pi ka)}{\sinh^2(\pi ka) + \cosh^2\left(\pi \sqrt{\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2} - \frac{1}{4}}\right)},$$

а за умови $\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2} = \frac{1}{4}$, виразом

$$\tau(E) = \tanh(\pi ka).$$

У наведених виразах

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Якщо потенціал ями задати за допомогою модифікованого потенціалу Пешль-Теллера у якому існують два зв'язані стани

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{U_0}{\cosh^2\left(\frac{x}{a}\right)} = -\frac{6}{\cosh^2\left(\frac{x}{a}\right)},$$

який відноситься до категорії т.з. безвідбивних потенціалів, а, отже, відповідний коефіцієнт проходження становить одиницю, що суттєво спрощує проведення розрахунків термоелектричних характеристик пов'язаних із тунельними механізмами переносу.

У загальному випадку потенціал для модифікованої ями Пешль-Теллера має вигляд

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2\left(\frac{x}{a}\right)},$$

а коефіцієнт проходження для неї є таким

$$\tau(E) = \frac{\sinh^2(\pi ka)}{\sin^2(\pi \lambda) + \sinh^2(\pi ka)}.$$

Якщо для виразу для коефіцієнта проходження квантової структури бар'єр-яма-бар'єр використати апроксимацію $\zeta(E) = \tau_1(E) \tau_2(E) \tau_3(E)$, у якій $\tau_1(E)$ – коефіцієнт проходження першого бар'єра, $\tau_2(E)$ – коефіцієнт проходження ями, а $\tau_3(E)$ – коефіцієнт проходження третього бар'єра, що є певним наближенням, то розрахунки термоелектричних характеристик суттєво спрощуються.

Порівняння результатів чисельного розрахунку із результатами розрахунку з використанням апроксимованого виразу для $\tau(E)$ показав, що відхилення між результатами не досягає і десяти відсотків, що робить застосувану апроксимацію зручним інструментом для експрес-прогнозування термоелектричних характеристик матеріалу за певних параметрів потенціала Пешль-Теллера.

Висновки

Запропоновано одновимірну модель наноструктурованого термоелектричного матеріалу для якої нанозерно моделюється потенціальною ямою, а міжзеренні межі – потенціальними бар'єрами. Яма і бар'єри моделюють потенціалом Гаусса із різними його параметрами. Процес моделювання реалізовано у вигляді програми розробленої на платформі пакету комп'ютерної математики Maple. З допомогою розробленої програми проведено обчислення обчислення температурних залежностей питомої провідності σ , коефіцієнта Зеебека S та фактора потужності $P = \sigma S^2$ і наведено їх графічну ілюстрацію.

Показано, що при збільшенні висоти бар'єрів та їх ширини провідність квантової структури зменшується, а коефіцієнт Зеебека – зростає. Разом з тим фактор потужності $P = \sigma S^2$ при зростанні висоти бар'єрів – зменшується, а зміна відстані між бар'єрами, тобто ширина ями, слабо впливає на термоелектричні характеристики запропонованої квантової структури.

Для точнорозв'язуваного випадку коли бар'єри і яма є прямокутними методом квантового імпедансу одержано аналітичний вираз для коефіцієнта проходження частинок. Засобами символічної математики пакету Maple проведено обчислення температурної залежності для питомої провідності σ ,

коефіцієнта Зеебека S та фактора потужності $P = \sigma S^2$. Показано що збільшення висоти бар'єрів спричиняє спадання питомої провідності і зростання коефіцієнта Зеебека.

Встановлено, що при зміні ширини потенціальної ями коефіцієнт Зеебека мало змінюється, а фактор потужності майже постійний. Для запропонованої моделі розглянуто вплив резонансного тунелювання частинок через квантову структуру бар'єр-яма-бар'єр на термоелектричні характеристики наноструктурованого матеріалу. Встановлено, що наявність резонансного тунелювання слабо впливає на коефіцієнт Зеебека і фактор потужності.

Для модифікованого потенціалу Пешль-Теллера при певних значеннях його параметрів вдається отримати аналітичні вирази для коефіцієнтів пропускання τ ями і бар'єра. Припускаючи що коефіцієнт пропускання системи бар'єр-яма-бар'єр рівний добутку коефіцієнтів пропускання складових цієї системи, показано, що відмінність між чисельним і аналітичним розрахунком практично відсутня. Такий результат свідчить про можливість застосування даного підходу (моделі) для швидкого аналізу термоелектричних параметрів наноматеріалу лише на основі відносно нескладних аналітичних виразів.

На основі запропонованої одновимірної моделі наноструктурованого термоелектричного матеріалу проведено розрахунок термоелектричних параметрів (коефіцієнт Зеебека, питома електропровідність та термоелектрична потужність) і встановлено, що числові значення термоелектричної потужності практично не залежать від виду вибраного потенціалу (Потенціал Гауса, Пешль-Теллера чи прямокутний і при однаковій його висоті та ширині відрізняються не більше ніж на 15.

На основі узагальнення отриманих результатів можна зробити висновок про те, що при варіаціях енергетичних параметрів, зокрема висоти і ширини потенціальних бар'єрів моделі наноструктурованого матеріалу якісного покращення термоелектричної потужності P досягти складно, а кількісна оптимізація величини фактора потужності при варіації висоти і ширини бар'єрів може бути досягнута на рівні 10-15.

Возняк О.М. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики та астрономії;
Горічок І.В. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики та астрономії;
Никуруй Л. – кандидат фізико-математичних наук, професор кафедри фізики та астрономії.

- [1] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus, *Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit*. Phys. Rev. B, 47(19), 12727 (1993); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.12727>.
- [2] L.D. Hicks, T.S. Harman, C.M. Dresselhaus, *Use of quantum-well superlattices to obtain a high figure of merit from nonconventional thermoelectric materials*: Appl. Phys. Lett. 63, 3230 (1993); <https://doi.org/10.1557/PROC-358-1035>.
- [3] M. Dresselhaus Ed all. D. *New directions for low-dimensional thermoelectric materials*. Adv. Mater., 19, 1043 (2007); <https://doi.org/10.1002/adma.200600527>.
- [4] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O'Quinn, *Thin-film thermoelectric devices with high room-temperature figures of merit*. Nature (London), 413, 597 (2001); <https://doi.org/10.1038/35098012>.
- [5] J. Zide ed all. *Demonstration of electron filtering to increase the Seebeck coefficient in $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.53}Ga_{0.28}Al_{0.19}As$ superlattices*. Phys. Rev. B 74, 205335-5 (2006); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.205335>.
- [6] B. Poudel et al. *High-thermoelectric performance of nanostructured bismuth antimony telluride bulk alloys*. Science 320, 634 (2008); <https://doi.org/10.1126/science.1156446>.
- [7] S.S. Gomez, R. Romero, *Few-electron semiconductor quantum dots with Gaussian confinement*. Cent. Eur. J. Phys. 7(1), 12 (2009); <https://doi.org/10.2478/s11534-008-0132-z>.
- [8] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*. IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957); <https://doi.org/10.1147/rd.13.0223>.
- [9] R. Landauer, *Electrical resistance of disordered one dimensional lattices*. Philos. Mag. 21, 863 (1970); <https://doi.org/10.1080/14786437008238472>.
- [10] P. Pichanusakorn, P. Bandaru, *Nanostructured thermoelectrics*. Mat. Scien. and Eng. R 67, 19 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.mser.2009.10.001>.
- [11] Yan Sun et al. *Strategies to improve the thermoelectric figure of merit in thermoelectric functional materials*. Front Chem., 10, 865281 (2022); <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.865281>.
- [12] P. Ahuja, *Introduction to Numerical Methods in Chemical Engineering. I Tridiagonal matrix algorithm (TDMA)*. ISBN 9788120340183, PHI Learning Pvt. Ltd., Ebook Status : Available, 520 p, (2010).
- [13] O.M. Voznyak, P.P. Kostrobij, V.Ye. Polovyi, *Modeling of thermoelectric characteristics of nanostructured material*. Mathematical modeling and computing, 11(3), 904 (2024); <https://doi.org/10.23939/mmc2024.03.904>.
- [14] A.N. Khondker, M.Rezwan Khan, A.F.M. Anwar, *Transmission line analogy of resonance tunneling phenomena: The generalized impedance concept*. J. Appl. Phys. 63, 5191 (1988); <http://dx.doi.org/10.1063/1.341154>.
- [15] O.M. Voznyak, O.O. Voznyak, *An exactly solvable model for calculating the thermoelectric characteristics of a nanostructured material*. Journal of Physical Studies, 29(3) (2025) (accepted).
- [16] V.M. Galitsky, B.M. Karnakov, V.I. Kogan, *Problems in quantum mechanics*. M, Nauka, 648 (1981).

O. Voznyak, I. Horichok, L. Nykyruy

Model for Calculating Thermoelectric Properties of Nanostructured Material

Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine, lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua

For the barrier-well-barrier model of nanostructured thermoelectric material, based on Gaussian, Poschl-Teller potentials and rectangular barriers and well, thermoelectric characteristics were calculated. For quantum barrier-well-barrier structures based on Gaussian and PoschlTeller potentials, a program was developed to calculate thermoelectric characteristics using the Thomas algorithm for calculating the transmission coefficient of particles through the quantum structure and numerical integration of expressions for electrical conductivity and Seebeck coefficient, with corresponding graphical illustration of the results obtained. The calculations program is implemented on the Maple computer mathematics platform. For the quantum structure based on rectangular potentials, using the quantum impedance method, an expression was obtained for the transmission coefficient of particles through such a structure and applied for the calculation of electrical conductivity, Seebeck coefficient, and power factor using symbolic mathematics of the Maple package. The influence of resonant tunneling of particles through the proposed triple-barrier structure on its thermoelectric characteristics is taken into account. An analysis of the obtained calculation results is presented.

Keywords: quantum tunneling mechanism of thermoelectric phenomena, model of nanostructured material, Seebeck coefficient, power factor.