

## DETERMINACIÓN DEL COEFICIENTE SEEBECK Y LA FIGURA DE MERITO PARA UN POZO CUANTICO

H. Ortiz<sup>1</sup> y J. Giraldo

Grupo de Física de la Materia Condensada

Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

### RESUMEN

A partir de la construcción de una superred basada en el modelo de Kronig- Penney se encuentra un valor analítico para el coeficiente Seebeck (S). Este valor es calculado para un pozo cuántico de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  hallando, con el valor de S, la Figura de Merito (ZT) con respecto a la temperatura, también se observa la influencia de el ancho de la barrera en ZT. Se observa el mismo comportamiento reportado en la literatura en este material y aporta al modelo, que se viene trabajando, un nuevo valor de S.

### INTRODUCCIÓN

Desde hace algunos años se están desarrollando, con bastante interés, materiales cuyo uso está radicado en desarrollar sistemas eficientes de enfriamiento, entre los más estudiados está el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [1]. La característica principal de estos compuestos es que en ellos se presentan fenómenos termoelectricos, es decir, poseen efectos que se originan en medios conductores bajo un gradiente de temperatura. Uno de estos fenómenos es el efecto Seebeck [2], el cual consiste en aplicar un gradiente de temperatura a un circuito cerrado no homogéneo surgiendo una corriente eléctrica en el circuito. La cantidad que gobierna el comportamiento de estos materiales se denomina la Figura de Merito  $ZT$ , sus dimensiones proveen una medida para el uso posible que se pueda obtener ya sea como un generador o como un sistema de enfriamiento.

La Figura de Merito está dada por  $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$  [3] donde S es el coeficiente Seebeck,  $\sigma$  la conductividad eléctrica,  $\kappa$  la conductividad térmica total y T es la temperatura. La información que el numerador de ZT lleva es el transporte electrónico, el cual depende de la estructura de bandas y los mecanismos de dispersión de los portadores de carga, a su vez, el denominador lleva información sobre la contribución de la conductividad térmica eléctrica y la contribución térmica de la red.

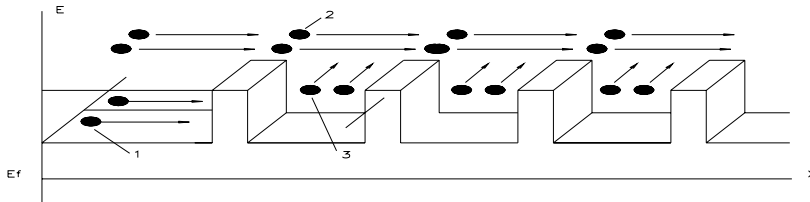
En el presente trabajo se propone una expresión para el coeficiente Seebeck, colocándola a prueba en un pozo cuántico construido a partir de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3 / \text{Sb}_2\text{Te}_3$  observando el comportamiento de ZT. Los datos necesarios para determinar ZT en este material son tomados de los resultados experimentales reportados en la literatura [1,2,4]. También el modelo busca contribuir a conocer el comportamiento termoelectrico de una superred semiconductor.

---

<sup>1</sup> E-mail: hmotriz@ciencias.unal.edu.co,

**CÁLCULO**

El trabajo esta basado en un potencial con un perfil de barreras rectangulares como el modelo de Kronig- Penney [5] para describir una superred como el sistema inicial de estudio, considerando las componentes de la masa efectiva de los electrones en este potencial. Dentro de este modelo se determina los niveles de energía en la superred.



**Fig. No.1.** Esquema de una superred de pozos cuánticos. Ef es el nivel de Fermi. Los portadores 1son aquellos que se mueven dentro del pozo, los portadores 2 son aquellos que se desplazan por encima de las barreras del pozo y los portadores 3 son los paralelos a la dirección de movimiento X, ellos en especial no presentan movimiento dentro de la superred [6]

A partir de este resultado se hallan los coeficientes  $\sigma$  y  $\kappa$  que determinan a ZT, obteniéndose:

$$\sigma = (e\mu_x/2\pi d)(2k_B T/h^2)(m_x m_y)^{1/2} I_0(\mu, T) \quad [1]$$

$$S\sigma = (e\mu_x/2\pi d)(2k_B T/h^2)(m_x m_y)^{1/2} I_1(\mu, T) \quad [2]$$

$$\kappa = (k_B \tau h^2/4\pi d)(2k_B T/h^2)(m_y/m_x)^{1/2} I_2(\mu, T) \quad [3]$$

donde  $e$  es la carga del electrón,  $\tau$  el tiempo de relajación,  $k_B$  la constante de Boltzman,  $\mu$  el potencial químico,  $d$  el ancho de la barrera que está conformando el pozo,  $\mu_x$  la movilidad a lo largo del eje  $x$ ,  $m_i$  la masa efectiva e  $I_i$  una función que depende de la función de Fermi-Dirac, mostrada en (4), para  $i = 0,1,2$ .

$$F_i(\mu, T) = \int_0^\infty \frac{x^i dx}{e^{(x - \frac{\mu}{k_B T})} + 1} \quad [4]$$

Bajo estas consideraciones se determina un nuevo valor para la Figura de Merito y esta es:

$$ZT = ((I_1^2/I_0)/I_2 - (I_1^2/I_0) + (1/\beta)) \quad [5]$$

$$\beta = \frac{1}{2\pi d} \frac{2K_B T}{h^2} \sqrt{m_x m_y} \frac{K_B T \mu_x}{ek_x} \quad [6]$$

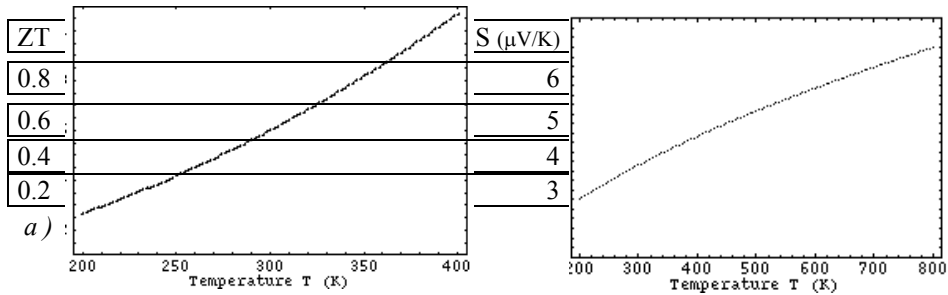
con el valor obtenido en (5) y el definido para ZT igualando estos dos valores se llega a:

$$S^2 = \frac{\left(4 \frac{F_1}{F_0} - 4F_1\zeta + \zeta + \zeta F_0\right) (\kappa_e + \kappa_p)}{\left(3F_2 + 4\zeta F_1 + \zeta^2 F_0 - 2 \frac{F_1}{F_0} + \zeta + \frac{1}{\beta}\right) (\sigma T)} \quad [7]$$

una nueva expresión para el coeficiente Seebeck en un pozo. Los resultados experimentales reportados en la literatura que han sido utilizados para el material  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  son:  $m_x = 1200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , la masa efectiva en la dirección de crecimiento de la barrera del pozo es  $m_y = 0.32 m_o$  donde  $m_o$  es la masa de electrón libre,  $m_x = 0.021 m_o$  y  $m_y = 0.081 m_o$  la conductividad térmica para cada capa será  $(\kappa_e + \kappa_p) = \kappa_l = 15 \text{ mW/cm K}$  a un cuarto de temperatura,  $b$  es tomado para este caso como 45 A.[7]

**RESULTADOS Y ANÁLISIS**

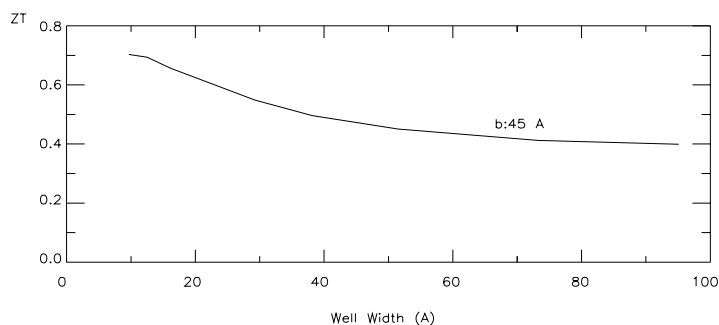
Nosotros realizamos cálculos a partir de las expresiones dadas anteriormente y haciendo uso del programa Matemática obtuvimos los siguientes resultados



**Fig. No.2.** a) Figura de merito evaluada con respecto a la temperatura. b) coeficiente Seebeck como función de la temperatura

Se observa la Figura de Merito para este material utilizando el valor obtenido para S de la expresión (7), determinando que ella se comporta como lo establecido en los resultados presentados por la literatura, su valor máximo se encuentra alrededor de uno con un valor alto de temperatura, significando que el valor del coeficiente Seebeck determinado en este escrito describe los resultados obtenidos por otros autores [7,8,9]. El inconveniente de este valor, es que el sistema de enfriamiento que se puede construir con este material no es muy eficiente, pero el pozo hecho a base de este material debe ser estudiado cuando forma una superred con barreras echas en otro material, debido a que existe la posibilidad de que la figura de merito aumente y se mantenga en un valor no muy alto de la temperatura con respecto a la temperatura ambiente, gracias a la construcción de un arreglo como el mostrado en la figura 1.

El coeficiente Seebeck hallado da cuenta de la figura de mérito del material, él también muestra un claro aumento, de forma lineal, con la temperatura en este material, tendiendo a estabilizarse en un rango de temperaturas alto.



**Fig. No. 3.** Figura de merito evaluada con respecto a el ancho de la barrera .

Otra característica que se observa es que la figura de merito, con el nuevo S, depende del ancho de la barrera impuesta en la construcción del pozo y vemos, de la gráfica 3, que para valores pequeños de este ancho se alcanza un  $ZT$  alto y este comportamiento también es de la misma forma, con valores cercanos, a los reportados [7]. Por lo tanto se ha mejorado el modelo que se viene trabajando y así se demuestra que en la construcción de una superred, el valor de S debe ser tenido en cuenta para mejorar la eficiencia del sistema que se pretende realizar, ya sea de enfriamiento o de generación debido a que el estudio echo es para materiales con comportamiento termoeléctrico.

#### AGRADECIMIENTOS

Este trabajo es realizado en su totalidad dentro del grupo de física de la materia condensada GFMC y agradezco la participación de todos los miembros de el grupo, en especial a profesor J. Giraldo por su constante colaboración y apoyo.

#### REFERENCIAS

- [ 1 ] L. D.Hicks, M. S. Dresselhaus; *PRB* (47) 19;12727
- [ 2 ] G. Mahan, B. Sales, J. Sharp; *Physics Today*; March 1997
- [ 3 ] L. D.Hicks, T. C. Harman, M. S. Dresselhaus; *Appl Phys Lett* (63) 23; 3230.
- [ 4 ] D. A. Briodo, T.L. Reinecke.; *PRB* (51) 19; 13797
- [ 5 ] N. Ashcroft, N. Mermin; *Solid State Physics*; 1976
- [ 6 ] L. I. Anatyshuk; *Thermoelectricity*; 1998
- [ 7 ] J. O. Sofo, G. Mahan; *Appl Phys Lett* (65) 21; 2690
- [ 8 ] G. A. Slack, V. G. Tosoukala; *J. Appl. Phy* (76) 3
- [ 9 ] P. J. Lin-Chung, T.L. Reinecke; *PRB* (51) 19