

DOI: 10.63527/1607-8829-2025-4-5-11

Нахуцрішвілі І. (<https://orcid.org/0000-0002-7961-3437>)

Інститут кібернетики Грузинського технічного університету,
вул. З. Анджaparідзе 6, 0186, Тбілісі

Автор-кореспондент: Нахуцрішвілі І., e-mail: iraklinakhutsrishvili52@gmail.com

Максимуми коефіцієнта потужності термоелектриків: математичний підхід та практика

Метою цієї статті є оцінка максимальних значень важливого термоелектричного параметра матеріалів – коефіцієнта потужності. На основі відомих з літератури формул, що зв'язують між собою термоелектричні параметри (ефективну масу та рухливість носіїв заряду, коефіцієнт Зеєбека, температуру), отримано функцію зазначеного коефіцієнта. Її обробка дозволяє використовувати отримані дані для аналізу тих робіт, у яких з певних причин не наводяться екстремуми зазначеного термоелектричного параметра.

Ключові слова: максимальний коефіцієнт потужності, термоелектричний модуль.

Вступ

Важлива характеристика термоелектричного матеріалу, коефіцієнт потужності ($PF \equiv \sigma S^2$, σ – питома електропровідність, S – коефіцієнт Зеєбека) часто має екстремальні значення залежно від температури (T), складу, концентрації носіїв заряду (n), енергії Фермі, тощо [1–7].

У цій роботі розглядається залежність $PF - T$. В одних випадках вона має мінімум, в інших – максимум, а в деяких випадках – обидва. Це продемонстровано на рис. (1, 2) на основі літературних та наших даних. Для практичних цілей цікаво визначити максимуми цієї термоелектричної характеристики, яка входить у вираз добротності $ZT \equiv \sigma S^2 T / k$ (k – теплопровідність).

Нижче буде запропоновано математичний підхід до питання. Зокрема, виявилось, що незважаючи на наявність кількох змінних величин у використаних формулах, немає потреби використовувати метод множника Лагранжа – можна застосувати звичайний розрахунок.

А потім отримані розрахункові дані будуть порівняні з експериментальними даними.

Цитування: Нахуцрішвілі І. (2025). Максимуми коефіцієнта потужності термоелектриків: математичний підхід та практика. Термоелектрика, (4), 5–12. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-4-5-11>

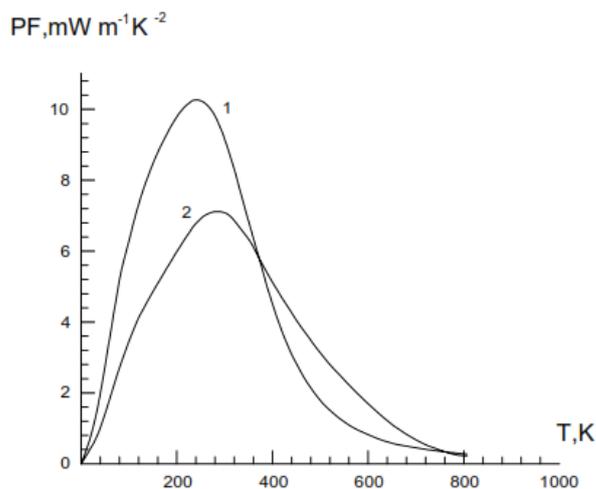


Рис. 1. Температурні залежності PF для: (1) $Fe_2V_{0.95}Ta_{0.05}Al_{0.9}Si_{0.1}$ та (2) $Fe_2V_{0.95}Ta_{0.05}Al_{0.8}Si_{0.2}$ [1]

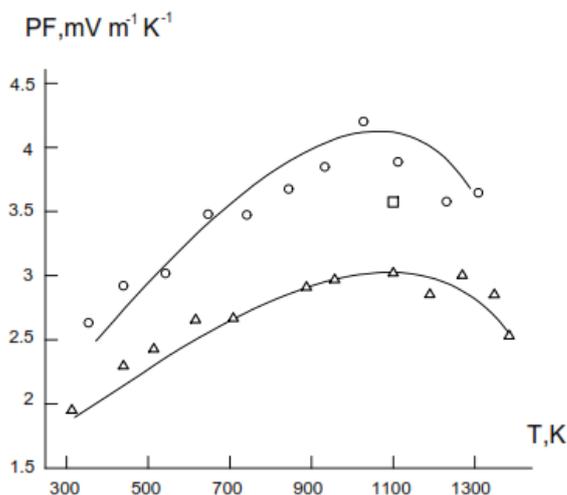


Рис. 2. Температурні залежності PF для (o) $Si_{0.72}Ge_{0.28}$ і (Δ) $Si_{0.83}Ge_{0.17}$ n-типу, \square – точка за рівнянням (3) (див.нижче)

Дискусія

Для складання виразу для коефіцієнта Зеебека (S), використовуючи формули, відомі з літератури [8], що пов'язують абсолютну температуру (T), ефективну масу (m^*) та концентрацію носіїв заряду (n), можна отримати наступний вираз:

$$f(S) \sim \left\{ \frac{[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{S_r [1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}]} + \frac{1}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\}. \quad (1)$$

Після цього розглянемо питання максимізації коефіцієнта потужності $\sigma S^2 = nq_e \mu S^2$.

Використовуючи рівняння з [8, 9], отримаємо: $\mu \cong \left(\frac{m^*}{m_0}\right)^{-3/2} \mu_W$,

$$\frac{m^*}{m_0} \sim \left(\frac{n^{2/3}}{T}\right) \left\{ \frac{3[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\}, \mu_W \sim \left\{ \frac{e^{(S_r-2)}}{1 + e^{-5(S_r-1)}} + \frac{\frac{3}{\pi^2} S_r}{1 + e^{5(S_r-1)}} \right\} \quad (\mu, \mu_W -$$

дрейфова та зважена рухливість, m_0 – маса спокою електрона, $S_r = \frac{q_e}{k_B} |S| \cong 11604 |S| -$

приведений коефіцієнт Зеєбека, q_e – елементарний заряд, k_B – стала Больцмана). Використовуючи ці вирази і рівняння (1), отримаємо:

$$PF \sim AT^{3/2}, \quad (2)$$

де

$$A = \left\{ \frac{[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\} \left\{ \frac{e^{(S_r-2)}}{1 + e^{-5(S_r-1)}} + \frac{\frac{3}{\pi^2} S_r}{1 + e^{5(S_r-1)}} \right\} \left\{ \frac{[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\}^2$$

(тут і далі всі величини наведені в системі одиниць СІ). При $S \geq 2 \cdot 10^{-4}$ В/К,

$A \cong [e^{(S_r-2)} - 0.17]^2 e^{(S_r-2)}$ з високою точністю.

Для визначення $(PF)_{\max}$, слід було використовувати метод множників Лагранжа та враховувати функцію $f(T, m^*, \mu_w) = f(T, S_r) = f(T, S)$. Але під час встановлення додаткової умови (**), T s скорочуються і $(PF)_{\max}$ розраховується легше.

Емпіричний результат (для наших зразків) такий:

$$(PF)_{\max} \cong 1.42 \cdot 10^{-8} A_{\max} T^{3/2}, \quad (3)$$

(T відповідає S_{\max}), що можна вважати прийнятним (див. рис. 2). У цьому випадку $S_r \cong 3.25$ (тобто $S \cong 2.8 \cdot 10^{-4}$ В/К), що також задовільно узгоджується з експериментом.

Зауважимо, що $(PF)_{\max}$ можна визначити і іншими способами: з σ_{\min} [11]: $(\sigma S^2)_{\max} = (a/\sigma_{\min}) - b$, $(\sigma S^2)_{\max} = c/(\sigma_{\min})^d$ (a , b , c і d – константи) або

$$\lg(\sigma S^2)_{\max} \cong 0.583(\lg \sigma_{\min})^2 - 3.332 \lg \sigma_{\min};$$
 а також з $(B_S)_{\min}$ [12] $(B_S = \left[\frac{e^{S_r-2}}{1 + e^{-5(S_r-1)}} + \frac{\frac{\pi^2}{3} S_r}{1 + e^{5(S_r-1)}} \right])$

масштабований коефіцієнт потужності). Також можна використовувати формули [13, 14] $S = (3k_B/2q_e) \ln T + C$, де $C = (k_B/q_e) \{C_0 + \ln[2(2\pi m^* k_B)^{3/2}/(2\pi \hbar^3)^3 n]\}$ (константа C_0 залежить від механізму розсіювання та приймає значення від 2 до 4, тобто C також є константою) і [13] $S = k_1/2\sigma + [(k_1/2\sigma)^2 + k_2/\sigma]^{1/2}$ (k_1, k_2 – константи) – див. рис. (3, 4).

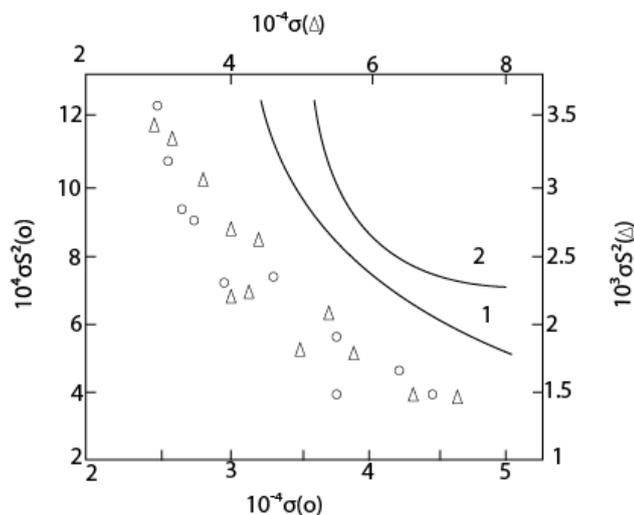


Рис. 3. Залежності $\sigma S^2 - \sigma$: (Δ) – $Si_{0.7}Ge_{0.3}$, (\circ) – $Tl_8Sn_2Te_6$ [15]; лінії без точок – схематичні графіки функцій $y = x^{-1/3}$ (1) та $y = ax^{-b}$, $b \neq 1/3$ (2). $[\sigma] = \text{Sim/m}$, $[\sigma S^2] = \text{Вт/К}^2\text{м}$

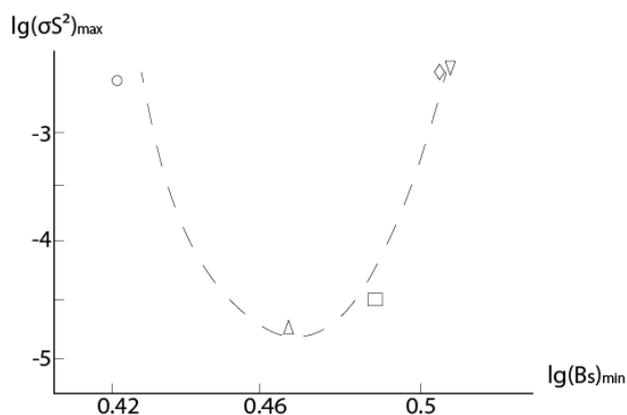


Рис. 4. Залежність $\lg(\sigma S^2)_{\max} - \lg(Bs)_{\min}$ у Si_xGe_{1-x} : $x = 0.7$ (○),
0.72 (Δ), 0.76 (□), 0.8 (◇) і 0.83 (▽)

На завершення слід зазначити, що на основі сплаву SiGe було розроблено термогенераторний модуль (рис. 5, 6). Його потужність становить 4.5 Вт. Цей матеріал використовувався в генераторах космічних апаратів та в багатьох інших галузях науки і техніки [16–18].



Рис. 5. Фото (×1) брикету, спресованого з ультра дисперсного порошку сплаву $Si_{0.7}Ge_{0.3}+P_{0.5}$ (ваг.%) при $1300\text{ }^\circ\text{C}$

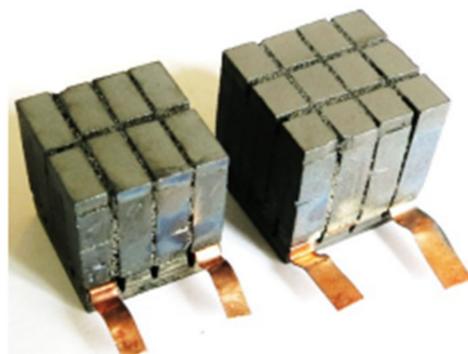


Рис. 6. Фото модулів з гілок 16 ($2.0 \times 2.0 \times 2.3$ см)
та 24 ($2.2 \times 2.2 \times 2.3$ см)

SiGe, що використовується в космічних апаратах, базується на сплавах з $x = 0.32$ та 0.2. Автор разом з дослідниками з Сухумського фізико-технічного інституту додатково зменшив вміст Ge. Був отриманий сплав зі складом $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$, про що буде повідомлено в майбутній публікації.

Висновки

Оцінено максимальні значення термоелектричного параметра матеріалів – коефіцієнта потужності. На основі відомих з літератури формул, що пов'язують термоелектричні параметри, отримано функцію згаданого коефіцієнта та оцінено його максимум. Отримані дані можуть бути використані для аналізу експериментальних даних тих робіт, в яких з певних причин не наведено максимуми заданого термоелектричного параметра. Розроблено термогенераторний модуль на основі сплаву SiGe для використання в космічних апаратах. Його потужність становить 4.5 Вт.

Виноски:

$$(*) S = (8\pi^2 k_B^2 / 3qeh^2) T m^* (\pi/3n)^{2/3} \cong 7.355 \cdot 10^{40} T m^* n^{-2/3},$$

$$m^* \cong 9.647 \cdot 10^{-46} n^{2/3} T^{-1} \left\{ \frac{[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\}.$$

(**) Враховуючи $n \cong 1.331 \cdot 10^{13} e^{S_r-2} / \{ (e^{S_r-2} - 0.17) [(1.17 - 0.216 / [1 + e^{\frac{8.617 \cdot 10^{-5} S_r - 1.01}{0.671}}])] \}$ [10], додатковою умовою є:

$$\phi = S - \lambda (8\pi^2 k_B^2 / 3qeh^2) T m^* (\pi/3n)^{2/3} \cong S - 7.355 \cdot 10^{40} \lambda T m^* n^{-2/3} \cong$$

$$\cong 8.617 \cdot 10^{-5} S_r - 1.987 \cdot 10^{-65} \lambda \left\{ \frac{[e^{(S_r-2)} - 0.17]^{2/3}}{1 + e^{-5(S_r - S_r^{-1})}} + \frac{S_r}{1 + e^{5(S_r - S_r^{-1})}} \right\}$$

$$\langle e^{S_r-2} / \{ (e^{S_r-2} - 0.17)^{2/3} [(1.17 - 0.216 / [1 + e^{\frac{8.617 \cdot 10^{-5} S_r - 1.01}{0.671}}])] \} \rangle^{-2/3} = 0.$$

Додаток

Технології виготовлення зразків SiGe та термоелектричних модулів на їх основі

Для створення термоелектричного модуля методом вакуумного гарячого пресування були отримані сплави $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_0.3$ з n- та p-типом провідності з концентрацією носіїв заряду $3.2 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$. Великі відходи Si та Ge подрібнювали сталевим стрижнем та просіювали через сито з розміром осередків 0.2 мм. Потім їх завантажували в камеру млина ПМ-100-СМ та подрібнювали протягом 20–25 годин. Розмір зерен порошку оцінювали за допомогою оптичного мікроскопа (Nicon) та рентгенівського дифрактометра (ДРОН-3М). Диспергований порошок, отриманий за заданим режимом, складався переважно із зерен Si та Ge розміром (60–80) нм. Отриманий порошок пресували у високотемпературній вакуумній індукційній камері за температури 1200–1320 °С та тиску 480 кг·см² протягом 20–30 хвилин. Матрицю та пуансон виготовляли з високоміцного графіту. З отриманих брикетів на алмазно-дисковому

верстатi вирiзали профiльованi зразки. До кiнцiв гiлок сплаву крiпилися графiтовi комутацiйнi пластини. Комутований зразок помiщали у вакуумну камеру iндукцiйної печi, а в його комутацiйних пластинах розмiщували датчики для вимiрювання температури та електричної сили. Одна сторона модуля нагрiвалася полум'ям, що утворювалося внаслiдок горiння газу, яке падало безпосередньо на поверхню модуля. З iншого боку модуль охолоджувався проточною водою. На гарячому та холодному кiнцях модуля розмiщували термопари з хромелю-алюмелю. Електроiзоляцiйний блок холодної сторони монолiтного термоелектричного модуля був виготовлений з використанням AlN та графiтових пластин (обидвi з них термомеханiчно сумiснi зi сплавами SiGe в широкому дiапазонi температур). Для виготовлення мiнi-монолiтного термоелектричного модуля, що мiстить 16 гiлок, було взято 4 пластини зi сплаву n- та p-типу (2 n-типу та 2 p-типу). Вони були розташованi в порядку n-p-n-p.

Мiнi-монолiтний термоелектричний модуль, що мiстить 24 гiлки, був виготовлений за аналогiчною технологiєю.

iнформацiя про авторiв

Нахуцрiшвiлi I. – Ph.D., старший науковий співробітник.

Лiтература

1. Hinterleitner B., Knapp I., Ponedner M., Shi Y., Müller H., Eguchi G., Eisenmenger-Sittner C., Stöger-Pollach M., Kakefuda Y., Kawamoto N., Guo Q., Baba T., Mori T., Ullah S., Chen X.-Q., Bauer E. (2019). Thermoelectric performance of a metastable thin-film Heusler alloy. *Nat.* 576 (7785), 85–90. (DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1751-9>)
2. Dehkordi M., Zebarjadi M., He J., T. M. Tritt T.M. (2015). Thermoelectric power factor: Enhancement mechanisms and strategies for higher performance thermoelectric materials. *Materials Sci. and Engin.: Rep.*, 97, 1–22. (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mser.2015.08.001>)
3. Samrand Shafeie S., Guo S., Hu Q., Fahlquist H., Erhart P., Palmqvist (2015). High-entropy alloys as high-temperature thermoelectric materials. *Appl. Phys.*, 118 (18), 184905. (DOI: <https://doi.org/10.1063/1.493548>)
4. Li P., Qiu P., Xu Q. (2022). Colossal Nernst power factor in topological semimetal NbSb₂. *Nat. Commun.* 13 (1), 7612. (DOI: [10.1038/s41467-022-35289-z](https://doi.org/10.1038/s41467-022-35289-z))
5. Wickramaratne D., Zahid F., Lake R. K. (2014). Electronic and thermoelectric properties of few-layer transition metal dichalcogenides. *Chem. Phys.*, 140, 124710.
6. Ge Y., Wan W., Ren Y., Liu Y. (2020). Large thermoelectric power factor of high-mobility transition-metal dichalcogenides with 1T phase. *Phys. Rev. Res.*, 2, 013134. (DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.013134>)
7. Zhou C., Lee Y. K., Yu Y., Byun S., Luo Z.-Z., Lee H., Ge B., Lee Y.-L., Chen X., Lee J. Y., Oana Cojocaru-Mirédin O., Chang H., Im J., Cho S.-P., Wuttig M., Dravid V. P., Mercouri G. Kanatzidis M. G., Chung I. (2021). Polycrystalline SnSe with a

- thermoelectric figure of merit greater than the single crystal. *Nat. Mater.* 20, 1378–1384. (DOI: <https://doi.org/10.1038/s41563-021-01064-6>)
8. Snyder G. J., Pereyra A., Gurunathan R. (2022). Effective mass from Seebeck coefficient. *Adv. Funct. Materials*, 32 (20), 2112772. (DOI: <https://doi.org/10.1002/adfm.202112772>)
 9. Snyder G. J., Snyder A. H., Wood M., Gurunathan R., Snyder B. H., Niu Ch. (2020). Weighted mobility *Adv. Mater.*, 32 (25), e2001537. (DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202001537>)
 10. Nakhutsrishvili I. (2025). Mutual connection between concentration of charge carriers and Seebeck coefficient in $\text{Si}_{0.96}\text{Ge}_{0.04}$ thermoelectric by annealing in the range (523–673) K. *Johns. Matth. Technol. Rev.*, 69 (3), 1–5. (DOI: <https://doi.org/10.1595/205651325X17302083510551>)
 11. Nakhutsrishvili I., Adamia Z. (2024). Optimizing power factor in $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys and some other thermoelectric materials: Insights and empirical relationships. *Materials Sci. Res. and Rev.* 7, (2), 204–209.
 12. Nakhutsrishvili I. (2024). Method for determining the maximum of power factor of some thermoelectric. *GESJ Phys.*, 1, 36–39.
 13. Kush L., Srivastava S., Jaiswal Y., Srivastava Y. (2020). Thermoelectric behaviour with high lattice thermal conductivity of nickel base $\text{Ni}_2\text{CuCrFeAl}_x$ ($x = 0.5, 1.0, 1.5$ and 2.5) high entropy alloys. *Materials Res. Expr.*, 7 (3), 035704. (DOI: <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab7d5a>)
 14. Tewari G. C., Tripathi T. S., Yamauchi H., Karppinen M. (2014). Thermoelectric properties of layered antiferromagnetic CuCrSe_2 . *Materials Chem. Phys.*, 145 (1/2), 156–161. (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2014.01.053>)
 15. Khan, W. H. Shah, N. Khan, Tufail M., Khan S., Syed W.A. (2021). Effects on the Seebeck coefficient and electrical properties of $\text{Tl}_{10-x}\text{A}_x\text{Te}_6$ ($\text{A} = \text{Pb} \ \& \ \text{Sn}$) in chalcogenide system. *Ovonic Res.*, 17 (2), 201–208.
 16. Cook B. (2022). Silicon–Germanium: The legacy lives on. *Energ.* 15 (8), 2957. (DOI: <https://doi.org/10.3390/en15082957>)
 17. Barbakadze K., Bokuchava G., Isakadze Z. (2022). High temperature thermoelectric generator based on SiGe alloy *LELP-Nat. Defence Acad. Geo.* 47, 45–52.
 18. Li Y., Wang G., Mehdi A.-S., Procek Marcin, Radamson H. H. (2021). Si and SiGe nanowire for micro-thermoelectric generator: A review of the current state of the art. *Front. in Mater.*, 8, 611078. (DOI: <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.611078>)
 19. Schwinge C., Kühnel K., Emara J., Roy L., Biedermann K., Weinreich W., Kolodinski S., Wiatr M., Gerlach G., Wagner-Reetz M. (2022). Optimization of LPCVD phosphorous-doped Si Ge thin films for CMOS-compatible thermoelectric applications. *Appl. Phys. Lett.*, 120, 031903. (DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0076945>)
 20. Chiang P. T., Hu Sh., Yen W. T., Wu H.-J., Hsu H.-P., Lan Ch.-W. (2023). A study of iron-doped SiGe growth for thermoelectric applications. *Alloys and Comp.*, 967, 171700. (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.171700>)
 21. Murata H., Nozawa K., Suzuki T., Kado Y., Suemasu T., Toko K. (2022). $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ anode

synthesis on plastic films for flexible rechargeable batteries. *Sci. Rep.*, 12, 13779. (DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-18072-4>)

Submitted: 20.10.25

I. Nakhutsrishvili (<https://orcid.org/0000-0002-7961-3437>)

Institute of Cybernetics of Georgian Technical University,
6 Anjaparidze str., 0186, Tbilisi

The Maximums of the Power Factor of Thermoelectrics: Mathematical Approach and Practice

The goal of this article is to assess of the maximum values of the important thermoelectric parameter of materials – the power factor. Based on the formulas known from the literature that interconnect the thermoelectric parameters (effective mass and mobility of charge carriers, the Seebeck coefficient, temperature), the function of the specified coefficient is obtained. Its processing allows the obtained data to be used for the analysis of experimental data of those works in which, for certain reasons, the extrema of the specified thermoelectric parameters are not given.

Keywords: maximum of power factor, thermoelectric module.

Надiйшла до редакцiї 20.10.25