

Закордонець В.С. (<https://orcid.org/0000-0001-8190-448X>)

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

Corresponding author: Закордонець В.С., e-mail: wladim21@gmail.com

Коефіцієнт термоелектричної потужності плоскошарових напівпровідникових структур

В квазікласичному одномінізонному наближенні досліджено вплив наноструктурування на коефіцієнт термоелектричної потужності плоскошарових напівпровідникових структур. Враховано зміну часу релаксації імпульсу носіїв струму в 2D структурах в порівнянні з їх 3D аналогами при змішаному розсіюванні імпульсу на акустичних фонах та точкових дефектах у випадку довільної статистики. Встановлено аналітичну залежність коефіцієнта термоелектричної потужності від хімпотенціалу та ширини мінізони провідності в напрямку осі надгратки.

Ключові слова: 2D структури, квантові ями, мінізона провідності, коефіцієнт термоелектричної потужності, час релаксації імпульсу, електронна теплопровідність, термоелектрична добротність.

Постановка проблеми

Високоякісний термоелектричний матеріал повинен одночасно мати велику термоЕРС і електропровідність та малу теплопровідність. Оскільки термоЕРС і електропровідність визначаються виключно електронними властивостями матеріалу, їх часто об'єднують в коефіцієнт термоелектричної потужності [1]

$$S = \alpha^2 \sigma, \quad (1)$$

де α і σ – відповідно коефіцієнти термоЕРС і електропровідності.

Для збільшення коефіцієнта потужності, (а отже і термоелектричної добротності) необхідно одночасно збільшувати коефіцієнти термоЕРС і електропровідності. Проте, збільшення термоЕРС матеріалу супроводжується зменшенням його електропровідності, так що максималізація величини S є складним завданням.

Цитування: Закордонець В.С. (2026). Коефіцієнт термоелектричної потужності плоскошарових напівпровідникових структур. *Термоелектрика*, (2), 40–46. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2026-2-40-46>

Отримано: 11.05.2026; Переглянуто: 11.06.2026; Опубліковано: 30.06.2026

© 2026 Автори. Це стаття з відкритим доступом, що розповсюджується відповідно до умов ліцензії Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Аналіз останніх досліджень і публікацій

В ряді робіт [2–5], в якості перспективного способу збільшення термоелектричної добротності (ТЕД) наноструктурованих напівпровідникових матеріалів розглядалося зниження фононної теплопровідності. Однак, численні експериментальні дослідження, присвячені вивченню об'ємних термоелектричних матеріалів з нанорозмірними включеннями та гранульованих нанокомпозитів показують, що термоелектричні властивості матеріалів можуть бути покращені шляхом збільшення коефіцієнта термоелектричної потужності навіть без зменшення теплопровідності ґратки. Зокрема, в [6, 7] було показано, що в надґратці квантових точок PbTe/PbTeSe в області кімнатних температур внаслідок збільшення коефіцієнта термоелектричної потужності спостерігалось двократне збільшення термоелектричної добротності в порівнянні з об'ємним зразком PbTe. Аналогічна картина спостерігалась також в наногранульованих PbTe [8], Si та Ge [9].

Метою роботи є дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності плоскошарової напівпровідникової структури в квазікласичному одномінізонному наближенні при змішаному розсіюванні носіїв струму на акустичних фононах і точкових дефектах при довільній статистиці та з урахуванням зміни часу релаксації в 2D-структурах в порівнянні з їх 3D аналогами.

Виклад основного матеріалу. Наявність границь поділу між шарами впливає на електронний спектр надґратки (НГ). В той час, як рух носіїв струму в напрямку перпендикулярному до осі НГ відповідає руху по широкій зоні провідності, як в масивному зразку, рух вздовж осі надґратки обмежений шарами наноструктурування. В цьому напрямку електронний спектр має мінізонний характер.

У випадку достатньо вузьких шарів, які являють собою квантові ями для електронів, всі електрони будуть знаходитися поблизу дна нижньої мінізони розмірного квантування. В рамках квазікласичного наближення $2\varepsilon_0 \gg \hbar/\tau_{2D}$, eE_0 , $a\nabla_z k_0 T$ закон дисперсії електронів в нижній мінізоні НГ описується співвідношенням [10, 11]

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + 2\varepsilon_0 (1 - \cos k_z a), \quad (2)$$

де $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, і k_z – поперечна і поздовжня до осі НГ компоненти квазіхвильового вектора, $m_{\perp}^*$ – поперечна ефективна маса, яка близька по величині до ефективної маси електронів напівпровідника, який формує НГ, a – період НГ, $2\varepsilon_0$ – ширина мінізони провідності НГ в напрямку k_z , E_0 – напруженість електричного поля, T – середня абсолютна температура.

Будемо розглядати змішане розсіювання електронів на акустичних фононах і точкових дефектах. Для обчислення загального часу релаксації імпульсу носіїв скористаємося правилом Матіссена

$$\frac{1}{\tau_{2D}} = \frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_d}, \quad (3)$$

де τ_a і τ_d – час релаксації імпульсу на акустичних фононах і точкових дефектах в 2D структурі.

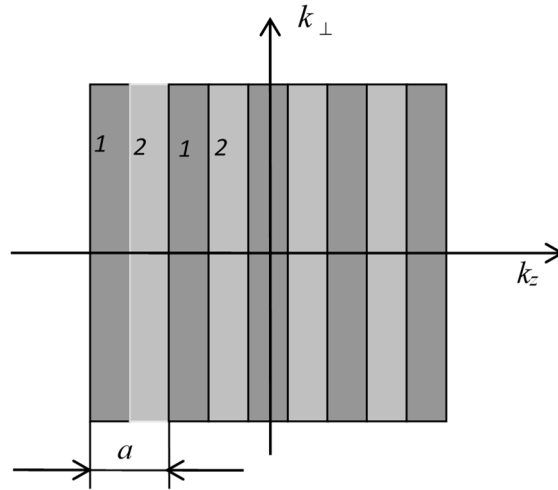


Рис. 1. Схематична будова плоскостарової структури з квантовими ямами на основі GaAs/AlAs. 1 – шар GaAs, 2 – шар AlAs

Враховуючи явний вигляд τ_a і τ_d [11] та зміну часу релаксації імпульсу носіїв струму в 2D структурах в порівнянні з масивними зразками [4], осьову складову тензора часу релаксації імпульсу носіїв струму в НГ запишемо у вигляді

$$\tau_{2D}(\epsilon) = \tau_{0eff} \left(\frac{\epsilon}{k_0 T} \right)^r, \quad (4)$$

де τ_{0a} і τ_{0d} – незалежні від енергії електрона постійні, $\tau_{0eff} = \tau_{0a} \tau_{0d} (\tau_{0a} + \tau_{0d})^{-1}$, r – параметр розсіювання.

Коефіцієнти електропровідності та термоЕРС знайдемо із співвідношень [5]:

$$\sigma_{2D} = \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int \tau_{2D}(\epsilon) v_z^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \frac{\epsilon}{k_0 T} d\vec{k}, \quad (5)$$

$$\alpha_{2D} = -\frac{k_0}{e} \left\{ \frac{\int \tau_{2D}(\epsilon) v_z^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \frac{\epsilon}{k_0 T} d\vec{k}}{\int \tau_{2D}(\epsilon) v_z^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\vec{k}} - \frac{\zeta}{k_0 T} \right\}, \quad (6)$$

де $f_0 = [1 + \exp(\varepsilon - \zeta)/k_0 T]^{-1}$ – рівноважна функція розподілу Фермі-Дірака із змінною в просторі абсолютною температурою T і хімічним потенціалом ζ , $v_z = \hbar^{-1} \partial \varepsilon(\vec{k}) / \partial k_z$ – швидкість електронів в напрямку осі надгратки, k_0 – постійна Больцмана.

З врахуванням (4) в формулах (5) і (6) перейдемо від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії. В сферичній системі координат для коефіцієнтів електропровідності та термоЕРС отримаємо:

$$\sigma_{2D} = \sigma_0 I_{0,2,0}(\eta, \beta), \quad (7)$$

$$\alpha_{2D} = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{I_{1,2,0}(\eta, \beta) + \beta I_{0,2,2}(\eta, \beta)}{I_{0,2,0}(\eta, \beta)} - \eta \right], \quad (8)$$

де

$$I_{k,l,m}(\eta, \beta) = \int_0^\pi F_k(\eta, z, \beta) (\sin z)^l \left(\sin \frac{z}{2} \right)^m dz, \quad (9)$$

$$F_k(\eta, z, \beta) = \int_0^\infty \frac{\exp\left(x - \eta + \beta \sin^2 \frac{z}{2}\right)}{\left[1 + \exp\left(x - \eta + \beta \sin^2 \frac{z}{2}\right)\right]^2} x^k dx, \quad (10)$$

трьохпараметричні інтеграли, σ_0 – постійна, яка визначається механізмами розсіювання імпульсу та матеріальними параметрами напівпровідника, $\varepsilon_\perp = \hbar^2 k_\perp^2 / 2m_\perp^*$ перпендикулярна до осі надгратки складова енергії, $x = \varepsilon_\perp / k_0 T$ – приведена енергія, $\eta = \zeta / k_0 T$ приведений хімічний потенціал, $z = ak_z$, $\beta = 2\varepsilon_0 / k_0 T$ – приведена ширина мінізони провідності в напрямку осі надгратки.

У випадку масивного зразка і параболічного закону дисперсії $\beta = 0$, і трьохпараметричні інтеграли (10) переходять в однопараметричні інтеграли Фермі

$$F_k(\eta) = \int_0^\infty \frac{\exp(x - \eta)}{[1 + \exp(x - \eta)]^2} x^k dx. \quad (11)$$

Розрахунок коефіцієнта термоелектричної потужності

Як видно із співвідношення (8) та рисунка 2, в 2D структурах, внаслідок різкої зміни густини станів поблизу рівня Фермі, та зміни часу релаксації імпульсу носіїв струму порівняно з масивними зразками, спостерігається збільшення коефіцієнта термоЕРС. Оскільки термоелектрична потужність пропорційна квадрату коефіцієнта термоЕРС, то його збільшення є особливо актуальним.

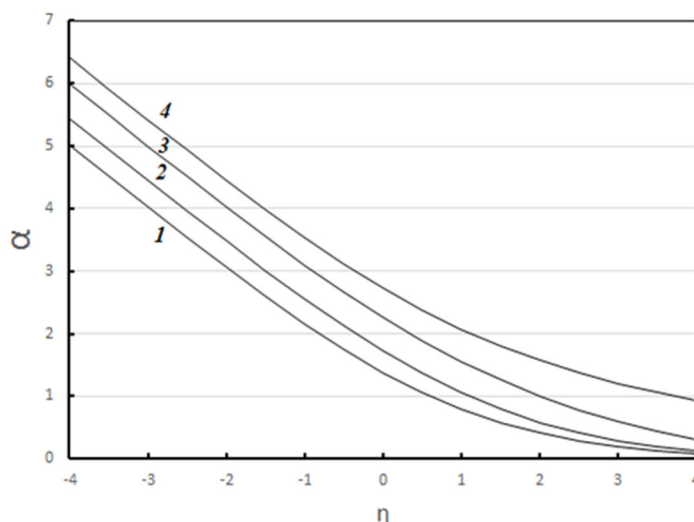


Рис 2 Залежність коефіцієнта термоЕРС (в одиницях k_0/e) від приведенного хімпотенціалу:

крива 1 для масивного зразка, криві 2-4 для наноструктурованого 2D матеріалу.

Крива 2 при $\beta = 1$, 3 – при $\beta = 3$, 4 – при $\beta = 5$

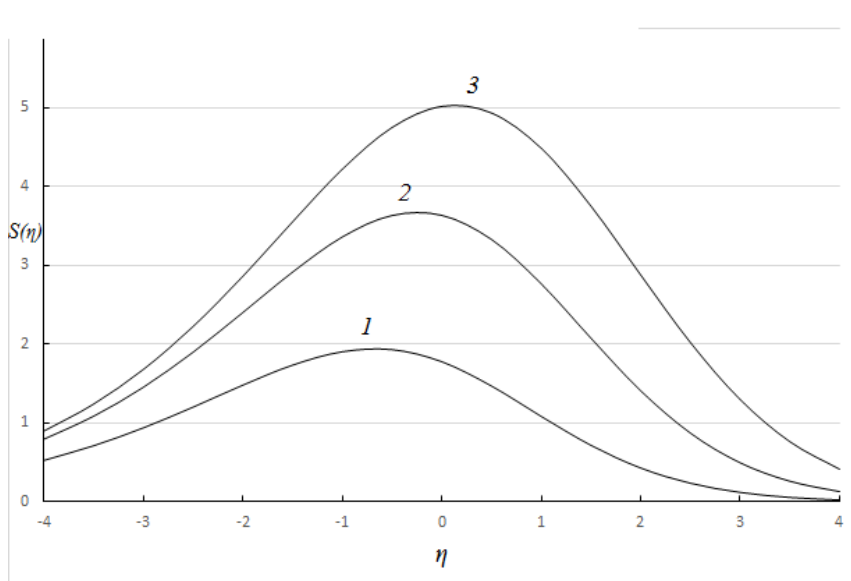


Рис 3 Залежність приведенного коефіцієнта термоелектричної потужності (в одиницях $k_0\sigma_0/e$) від приведенного хімпотенціалу: крива 1 для масивного зразка, криві 2, 3 для наноструктурованого матеріалу. Крива 2 для $\beta = 3$, 3 – для $\beta = 5$

Коефіцієнт термоелектричної потужності надграток залежить від хімічного потенціалу η , та ширини мінізони провідності, причому залежність $S(\eta)$ має екстремум, який при збільшенні ширини мінізони провідності зміщується в бік більших значень хімпотенціалу.

Використовуючи аналітичні залежності знайдених кінетичних коефіцієнтів знайдемо відношення термоелектричних потужностей наноструктурованого і масивного зразків.

$$n(\eta) = \frac{S_{2D}}{S_{3D}} = \left(\frac{\alpha_{2D}}{\alpha_{3D}} \right)^2 \left(\frac{\sigma_{2D}}{\sigma_{3D}} \right). \quad (12)$$

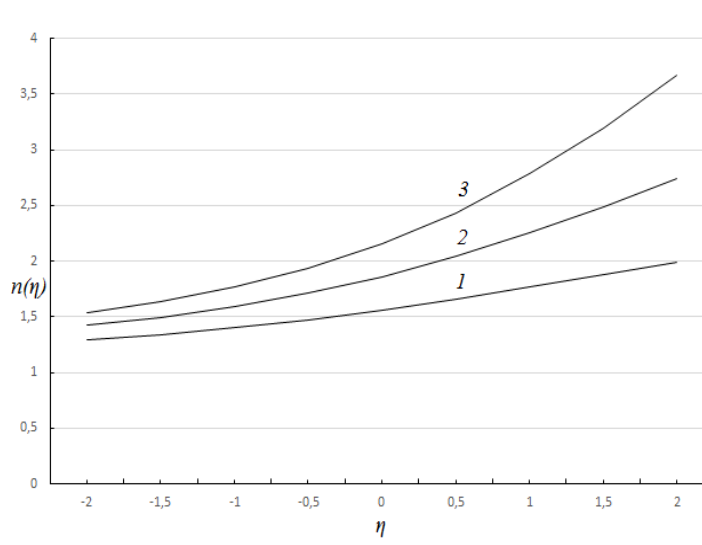


Рис. 4. Залежність відносної термоелектричної потужності від приведенного хімпотенціалу: крива 1 для $\beta=1$, 2 – для $\beta=3$, 3 – для $\beta=5$

Числовий аналіз (12), та рисунків 3 і 4, показує, що коефіцієнт термоелектричної потужності наноструктурованих термоелектриків завжди більший ніж в масивних зразках, і збільшується, із збільшенням ширини мінізони провідності. Зокрема, в області кімнатних температур, за умови оптимального легування, та при ширині мінізони провідності $\beta = 1$, відношення потужностей складає $n = 1.5$, при ширині $\beta = 3$ – $n = 2$, а при $\beta = 5$ збільшується до $n = 2.5$. Тому, слід очікувати, що наноструктурування приведе до збільшення термоелектричної добротності 2D зразків, в порівнянні з їх об'ємними аналогами, навіть без зменшення фононної теплопровідності.

Висновки

Отримано аналітичний вираз, який описує вплив наноструктурування на термоелектричну потужність плоскошарових напівпровідникових структур.

Показано, що коефіцієнт термоелектричної потужності надграток залежить від хімічного потенціалу η , та ширини мінізони провідності, причому залежність $S(\eta)$ має максимум, який при збільшенні ширини мінізони провідності зміщується в бік більших значень хімпотенціалу.

Встановлено, що в 2D структурах, порівняно з їх 3D аналогами, внаслідок різкої зміни густини станів поблизу рівня Фермі, та зміни часу релаксації носіїв струму спостерігається збільшення коефіцієнта термоелектричної потужності. Це може сприяти збільшенню термоелектричної добротності навіть без зменшення фононної теплопровідності.

Інформація про авторів:

Закордонець В.С. – к.ф.-м.н., доцент.

Література

1. Anatyshuk L.I. (1979). *Termoelementy i termoelektricheskiye ustroystva [Thermoelements and thermoelectric devices]*. Kyiv: Naukova dumka.
2. The best thermoelectric. G D Mahan and J O Sofo Authors Info & Affiliations. July 23, 1996. 93 (15) 7436-7439. //doi.org/10.1073/pnas.93.15.7436.
3. Venkatasubramanian R. (1997). MOCVD of Bi₂Te₃, Sb₂Te₃ and their superlattice structures for thin-film thermoelectric applications. *Journal of Crystal Growth*, 170 (1–4), 721–817.
4. Zakordonets V.S. (2021). ThermoEMF in semiconductor superlattices at scattering of current carriers on phonons and point defects. *J. Thermoelectricity*, 1, 23–31.
5. Zakordonets V.S. (2021). Thermoelectric figure of merit of semiconductor superlattices. *J. Thermoelectricity*, 3, 33–44.
6. Harman T. (2002). Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices. *Science*, 297, 2229–2232.
7. Harman T.C. (2005). Nanostructured thermoelectric materials. *J. Electron. Mater.*, 34, L19 – L22.
8. Heremans J. P. (2004). Thermopower enhancement in lead telluride nanostructures. *Phys. Rev.*, 70, 115334–115334-5.
9. Dresselhaus M.S. (2006). New directions for nanoscale thermoelectric materials research. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 886, 3–12.
10. Kubakaddi S.S., Mulimani B.G., Jali V.M. Quantum Theory of Thermopower in Quasi-Two-Dimensional Semiconductor Quantum Well Structures. doi.org/10.1002/pssb.2221390125
11. Tretyak O.V., Lozovsky V.Z. (2007). *Fundamentals of Semiconductor Physics: Textbook: in 2 volumes*. Kyiv, Vol.1., 338 p.

V.S. Zakordonets (<https://orcid.org/0000-0001-8190-448X>)

Ternopil Ivan Puluj National Technical University, Ukraine

Thermoelectric Power Factor of Flat-Layer Semiconductor Structures

The influence of nanostructuring on the thermoelectric power factor of flat-layer semiconductor structures is studied in the quasi-classical one-miniband approximation. The change in the pulse relaxation time of current carriers in 2D structures as compared to their 3D counterparts in the case of mixed scattering of the pulse by acoustic phonons and point defects in the case of arbitrary statistics is taken into consideration. The analytical dependence of the thermoelectric power factor on the chemical potential and the width of the conduction miniband in the direction of the superlattice axis is established.

Keywords: 2D structures, quantum wells, conduction miniband, thermoelectric power factor, pulse relaxation time, electron thermal conductivity, thermoelectric figure of merit.