

PACS numbers: 66.70.Lm, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 73.50.Lw, 74.25.fg, 84.60.Rb, 85.80.Fi

Термоэлектрические коэффициенты в транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма

Ю. А. Кругляк

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15,
65016 Одесса, Украина

На основе концепции «снизу–вверх» транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма строго выведены основные уравнения термоэлектричества с соответствующими транспортными коэффициентами для $1D$ -проводников в баллистическом режиме и для $3D$ -проводников в диффузионном режиме с произвольной дисперсией и в любом масштабе. Процессы рассеяния учтены феноменологически. В коэффициенте прохождения $T(E) = \lambda(E)/[\lambda(E) + L]$ средняя длина свободного пробега описана степенным законом. Подробно рассмотрены биполярная проводимость, закон Видемана–Франца и числа Лоренца, соотношение Мотта. В справочных целях в Приложении приведены выражения для термоэлектрических коэффициентов для $1D$ -, $2D$ - и $3D$ -полупроводников с параболической дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах через стандартные интегралы Ферми–Дирака.

За концепцією «знизу–вгору» транспортної моделі Ландауера–Датти–Лундстрёма одержано базові рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами для $1D$ -провідників у балістичному режимі і для $3D$ -провідників у дифузійному режимі з довільною дисперсією й у будь-якому масштабі. Процеси розсіяння враховано феноменологічно. В коефіцієнті проходження $T(E) = \lambda(E)/[\lambda(E) + L]$ середню довжину вільного пробігу описано степеневим законом. Докладно розглянуто біполярну провідність, закон Відеманна–Франца та Лорентцові числа, Моттове співвідношення. Задля довідки у Додатку наведено вирази для термоелектричних коефіцієнтів для $1D$ -, $2D$ - та $3D$ -напівпровідників з параболическою дисперсією в балістичному і дифузійному режимах через стандартні інтеграли Фермі–Дірака.

Based on the ‘bottom–up’ approach of the Landauer–Datta–Lundstrom transport model, the basic equations of thermoelectricity with the corresponding transport coefficients for both the $1D$ conductors in the ballistic regime and the $3D$ conductors in the diffusion regime with an arbitrary dis-

persion and in any scale are derived. The scattering processes are accounted phenomenologically. In transmission coefficient $T(E) = \lambda(E)/[\lambda(E) + L]$, the average free-path length is described by power law. Bipolar conductivity, the Wiedemann–Franz law, Lorenz numbers, and the Mott relation are discussed in details. In Appendix for reference purposes, the thermoelectric coefficients for $1D$, $2D$, and $3D$ semiconductors with parabolic dispersion in the ballistic and diffusive regimes are expressed through standard Fermi–Dirac integrals.

Ключевые слова: нанозифика, наноэлектроника, молекулярная электроника, термоэлектрические коэффициенты, интегралы Ферми–Дирака.

(Получено 17 февраля 2014 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная транспортная модель Ландауэра–Датты–Лундстрема (ЛДЛ) применительно к наноэлектронике изложена в [1, 2]. Модель ЛДЛ на многочисленных примерах обработки экспериментальных данных показала свою эффективность при вычислении проводимости и других электрофизических свойств резисторов любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом или диффузионном режиме как вблизи 0 К, так и при более высоких температурах.

С позиций концепции «снизу–вверх» модели ЛДЛ в [3] рассмотрена физика термоэлектрических явлений Зеебека и Пельтье и качественно обсуждены закон Видемана–Франца, числа Лоренца и основные уравнения термоэлектричества с соответствующими транспортными коэффициентами.

Теперь получим строгие результаты, сформулированные без доказательств в [3], для $1D$ -, $2D$ - и $3D$ -проводников с произвольной дисперсией и любого масштаба в режимах от баллистического до диффузионного, включая переходные режимы. С подробными выкладками покажем, как получаются термоэлектрические коэффициенты для $1D$ -баллистического транспорта и для $3D$ -диффузионного. Основным объектом обсуждения будут n -проводники, вместе с тем покажем каким образом распространить результаты на p -проводники. В рамках модели ЛДЛ рассмотрим биполярную проводимость, закон Видемана–Франца и числа Лоренца, соотношение Мотта.

В заключение в справочных целях приведем сводку термоэлектрических коэффициентов для $1D$ -, $2D$ - и $3D$ -полупроводников с параболической дисперсией в баллистическом режиме, а также в диффузионном со степенным законом рассеяния, выраженных через стандартные интегралы Ферми–Дирака.

2. «ДВИЖУЩИЕ СИЛЫ» ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

Общее выражение для электрического тока [1, 2]

$$I = -I_x = \frac{2q}{h} \int T(E)M(E)(f_1 - f_2)dE \quad (1)$$

утверждает, что любые причины, вызывающие различие между фермиевскими функциями контактов проводника, порождают ток, где $T(E)$ — коэффициент прохождения, а $M(E)$ — число мод проводимости. Знак «-» в этом выражении указывает, что ток считается положительным, если он входит в контакт 2 (рис. 5 [3]) в направлении отрицательной полуоси x , электроны при этом движутся по проводнику слева направо от контакта 1 к контакту 2 в направлении положительной полуоси x .

Различают две «движущие силы», порождающих ток: разность потенциалов и разность температур контактов. Электроны переносят как заряд, так и тепло. Зарядовый ток даётся уравнением (1). Чтобы получить общее выражение для термотока, рассуждаем следующим образом. Электроны внутри контакта движутся при энергии $E \approx E_F$. Чтобы зайти в моду проводимости $M(E)$ резистора со стороны истока S электрон должен выделить ($E_F > E$), а со стороны стока D — поглотить ($E_F < E$) тепловую энергию в количестве $|E - E_F|$. Выражение для термотока получается просто внесением $(E - E_F)/q$ под знак интеграла в (1), так что в итоге термоток

$$I_Q = \frac{2}{h} \int (E - E_F)T(E)M(E)(f_1 - f_2)dE. \quad (2)$$

Уравнения (1) и (2) есть общие выражения для зарядового тока и для термотока. Далее сразу перейдём к рассмотрению тока в режиме линейного отклика $f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E) \approx f_0(E)$ [1].

На рисунке 1 показан ход фермиевских функций $f_1 > f_2$ при одинаковой температуре контактов и $\Delta V = V_2 - V_1 > 0$, так что ток положительный.

В этом случае знак тока не зависит от того, речь идёт о n -проводнике или о p -проводнике. В режиме линейного отклика имеем [1]:

$$f_1 - f_2 \approx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) q\Delta V, \quad (3)$$

где фермиевское окно проводимости $(-\partial f_0/\partial E) \approx \pm 2kT$, охватывающее равновесное значение электрохимического потенциала $E = E_{F0}$, «фильтрует» электроны и пропускает в проводник только те из них, энергия которых лежит в пределах окна Ферми.

Рисунок 2 показывает ситуацию, когда электрохимические по-

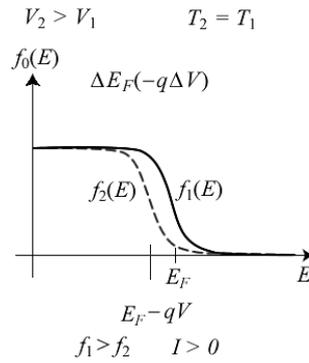


Рис. 1. Качественный ход фермиевских функций при приложении разности потенциалов к контактам, находящимся при одной и той же температуре.

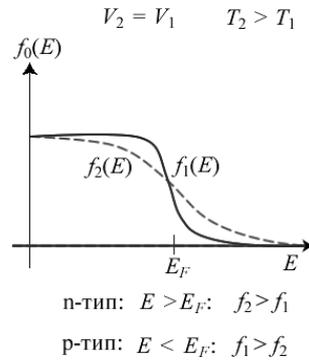


Рис. 2. Качественный ход фермиевских функций без приложения разности потенциалов к контактам, находящимся при разных температурах.

тенциалы контактов одинаковы ($E_{F1} = E_{F2}$, $V_2 = V_1$), а температура контактов разная с $\Delta T = T_2 - T_1 > 0$.

В этом случае $f_1 > f_2$ для энергий электронов ниже уровня Ферми ($E < E_F$) и $f_1 < f_2$ для энергий электронов выше уровня Ферми ($E > E_F$). Направление тока зависит от того, как расположены моды проводимости проводника: если выше уровня Ферми (n -проводник), ток положительный, если же ниже уровня Ферми (p -проводник), ток отрицательный (электроны движутся по проводнику справа налево от контакта 2 к контакту 1). В режиме линейного отклика разность фермиевских функций разложим в ряд Тейлора и ограничимся членом первого порядка:

$$f_1 - f_2 \approx f_1 - \left(f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial T} \Delta T \right) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial T} \right) \Delta T. \quad (4)$$

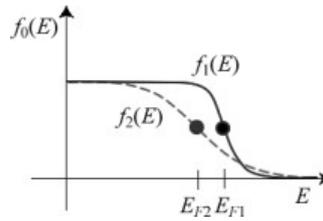


Рис. 3. Качественный ход фермиевских функций при приложении разности потенциалов к контактам, находящимся при разных температурах.

Дифференцирование функции Ферми по температуре (формула (28) в [1]) даёт:

$$f_1 - f_2 \approx - \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - E_F}{T} \Delta T, \quad (5)$$

где $T = (T_1 + T_2)/2$.

Действие обеих движущих сил, разности электрохимических потенциалов и разности температур контактов иллюстрируется рис. 3.

В режиме линейного отклика эффекты от обеих «сил» просто складываются:

$$f_1 - f_2 \approx \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) q \Delta V - \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - E_F}{T} \Delta T. \quad (6)$$

3. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК

Окончательное выражение для суммарного тока есть сумма вкладов от всех мод проводимости:

$$I = \int I'(E) dE, \quad (7)$$

где ток в дифференциальной форме

$$I'(E) = \frac{2q}{h} T(E) M(E) (f_1 - f_2). \quad (8)$$

Подставляя разность фермиевских функций через (6), получаем

$$I'(E) = G'(E) \Delta V + S'_T(E) \Delta T, \quad (9)$$

где

$$G'(E) = \frac{2q^2}{h} T(E) M(E) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \quad (10)$$

есть дифференциальная проводимость, а

$$S'_T(E) = -\frac{2q^2}{h} T(E) M(E) \left(\frac{E - E_F}{qT} \right) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = -\frac{k}{q} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) G'(E) \quad (11)$$

есть коэффициент Соре термодиффузии в дифференциальной форме. Видно, что он отрицателен для энергий электронов выше энергии Ферми (n -проводники) и положителен для энергий электронов ниже энергии Ферми (p -проводники).

Остаётся проинтегрировать дифференциальный ток (7). Окончательно получаем:

$$I = G\Delta V + S_T\Delta T, \quad (12)$$

где проводимость

$$G = \int G'(E)dE, \quad (13)$$

коэффициент Соре термодиффузии

$$S_T = \int S'_T(E)dE = -\frac{k}{q} \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) G'(E)dE \text{ [A/K]}. \quad (14)$$

Оба эти уравнения справедливы для проводников любой размерности и любого масштаба в режимах от баллистического через квазibalлистический до диффузионного.

4. ТОК В МАССИВНЫХ ПРОВОДНИКАХ

Ток в массивных проводниках в режиме диффузионного транспорта описывается уравнениями (1)–(3) работы [3]. Из них уравнение (2) для плотности тока, выраженной через электрическое поле (3), справедливо для однородных проводников без учёта коэффициента диффузии (уравнение (104) в [1]). Как переписать эти уравнения с учётом перепада температур на контактах?

Воспользуемся уравнением (12) и напомним, что в этом уравнении ток считается положительным и направлен он в сторону отрицательной полуоси x (рис. 5 в [3]). Делим ток на площадь поперечного сечения проводника со знаком «минус» и получаем плотность тока в направлении положительной полуоси x :

$$J_x = -\frac{G}{A} \Delta V - \frac{S_T}{A} \Delta T. \quad (15)$$

Разделим и умножим это уравнение на длину проводника L . Тогда

$$J_x = -G \frac{L}{A} \frac{\Delta V}{L} - S_T \frac{L}{A} \frac{\Delta T}{L}. \quad (16)$$

В диффузионном режиме

$$G = \sigma \frac{A}{L} \quad (17)$$

и по аналогии

$$S_T = s_T \frac{A}{L}, \quad (18)$$

где s_T есть удельное значение термодиффузионного коэффициента $S_{\text{оре}}$. С учётом также того, что $-q\Delta V/L \approx d(E_F)/dx$ и $\Delta T/L \approx dT/dx$, получается искомое уравнение для плотности тока в массивном проводнике с учётом градиента не только электрохимического потенциала, но и температуры:

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - s_T \frac{dT}{dx} \text{ [A/m}^2\text{]}. \quad (19)$$

Для n -проводников проводимость положительна, а коэффициент $S_{\text{оре}}$ отрицателен. Для p -проводников и электронная проводимость и коэффициент $S_{\text{оре}}$ положительны. К подробному обсуждению проводимости в n - и p -проводниках ещё вернёмся.

5. ПЕРЕНОС ТЕПЛА ЭЛЕКТРОНАМИ

Потоки тепла на контактах определяются уравнением (2). Перепишем его в дифференциальной форме:

$$I'_Q(E) = \frac{2}{h} (E - E_F) T(E) M(E) (f_1 - f_2), \quad (20)$$

так что

$$I_Q = \int I'_Q(E) dE. \quad (21)$$

В режиме линейного отклика для разности фермиевских функций воспользуемся выражением (6), а также выражениями (10) и (11) для дифференциальных проводимости $G'(E)$ и коэффициента $S_{\text{оре}} S'_T(E)$. Тогда

$$I'_Q(E) = -T S'_T(E) \Delta V - K'_0(E) \Delta T, \quad (22)$$

где

$$K'_0(E) = \frac{(E - E_F)^2}{q^2 T} G'(E). \quad (23)$$

Интегрирование по всему спектру энергий даёт:

$$I_Q = -TS_T \Delta V - K_0 \Delta T \text{ [Вт]}, \quad (24)$$

где

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 G'(E) dE \text{ [Вт/К]} \quad (25)$$

есть электронная теплопроводность в условиях короткозамкнутой цепи ($\Delta V = 0$).

Итак, из общих уравнений для электрического тока (1) и термотока (2) получены соответствующие выражения (12) и (24) для режима линейного отклика. Эти выражения показывают, что различие в электрохимических потенциалах и температуре контактов приводит к электрическому току и переносу тепла электронами. Этому режиму соответствуют три транспортных параметра: проводимость G (13), коэффициент термодиффузии Соре S_T (14) и электронная теплопроводность K_0 (25). Они справедливы для проводников любой размерности и для режимов от баллистического до диффузионного.

Для 3D-проводника в диффузионном режиме электрический ток описывается транспортным уравнением (19). Плотность теплового потока даётся уравнением

$$J_{Qx} = TS_T \frac{d(E_F / q)}{dx} - \kappa_0 \frac{dT}{dx} \text{ [Вт/м}^2\text{]}, \quad (26)$$

а соответствующие этим двум уравнениям (19) и (26) транспортные параметры включают удельную проводимость σ и удельные значения термодиффузионного коэффициента Соре и удельную теплопроводность, выраженные через дифференциальную проводимость $\sigma'(E)$:

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \sigma'(E) dE = \frac{2q^2}{h} \langle M_{3D} \rangle \langle \langle \lambda \rangle \rangle, \\ \sigma'(E) &= \frac{2q^2}{h} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [1/(\text{Ом} \cdot \text{м} \cdot \text{Дж})], \\ s_T &= -\frac{k}{q} \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE \text{ [А/(м} \cdot \text{К)}], \end{aligned} \quad (27)$$

$$\kappa_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \sigma'(E) dE \text{ [Вт/(м·К)].} \quad (28)$$

Отметим, что уравнения (19) и (26) справедливы и для 1D- и 2D-проводников, но единицы измерения будут другими.

6. ОБРАЩЁННАЯ ФОРМА ТРАНСПОРТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Пары уравнений для токов (12) и (24) и для плотностей (19) и (26) получились естественным образом из общих уравнений (1) и (2) применительно к режиму линейного отклика. Они соответствуют экспериментальной ситуации, когда для заданной разности потенциалов и температур измеряются токи и потоки тепла. Если первые могут быть заданы независимо друг от друга, то потоки электронов и тепла взаимозависимы. В таком представлении вклады от всех мод проводимости складываются друг с другом. С точки зрения проведения экспериментов часто бывает удобным переписать эти уравнения таким образом, чтобы электрический ток и разность температур стали независимыми величинами. Обращённые таким образом уравнения (12) и (24) таковы:

$$\Delta V = RI - S\Delta T, \quad (29)$$

$$I_Q = -\Pi - K\Delta T, \quad (30)$$

где

$$S = \frac{S_T}{G}, \quad (31)$$

$$\Pi = TS, \quad (32)$$

$$K = K_0 - \Pi SG. \quad (33)$$

В этом представлении вклады от разных мод проводимости не суммируются, например, сопротивление $R \neq \int R(E)dE$.

Для 3D-проводника в диффузионном режиме обращение уравнений (19) и (26) даёт следующую пару уравнений:

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = \rho J_x + S \frac{dT}{dx}, \quad (34)$$

$$J_{Qx} = TSJ_x - \kappa \frac{dT}{dx} \quad (35)$$

с транспортными коэффициентами

$$\rho = \frac{1}{\sigma}, \quad (36)$$

$$S = \frac{s_T}{\sigma}, \quad (37)$$

$$\kappa = \kappa_0 - S^2 \sigma T, \quad (38)$$

Часто можно встретить уравнение (34) с левой частью, записанной через электрическое поле.

7. ТРАНСПОРТНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ 1D ПРОВОДНИКОВ

Рассмотрим 1D-проводник в баллистическом режиме с одной занятой подзоной. Вычислим его транспортные параметры из общих уравнений (12) и (24) или (29) и (30). В нашем случае коэффициент прохождения $T(E) = 1$ и число мод проводимости $M(E) = g_v$, где g_v есть долинное вырождение. Хотя мы и предполагаем, что занята только одна подзона, но в зависимости от зонной структуры g_v может отличаться от единицы. Например, в углеродных нанотрубках, часто рассматриваемых в качестве идеальных 1D-проводников, $g_v = 2$ [4].

В случае 1D-проводников все, что нам нужно знать об их зонной структуре, это только значение долинного вырождения.

Для вычисления проводимости сначала обратимся к дифференциальной проводимости (10). В нашем случае

$$G'(E) = \frac{2q^2}{h} g_v \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (39)$$

так что проводимость

$$G = \frac{1}{R} = \frac{2q^2}{h} g_v \int_{E_c}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \frac{2q^2}{h} \langle M \rangle. \quad (40)$$

Интеграл в этом выражении есть число мод проводимости, который в случае полного вырождения ($T = 0$ К) $\langle M \rangle = g_v$. В общем же случае

$$\langle M \rangle = g_v \int_{E_c}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = g_v \frac{\partial}{\partial E_F} \int_{E_c}^{\infty} f_0 dE, \quad (41)$$

где использовано свойство фермиевской функции (см. (28) в [1])

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} = +\frac{\partial f_0}{\partial E_F}. \quad (42)$$

Для вычисления правого интеграла в (41)

$$\langle M \rangle = g_v \frac{\partial}{\partial E_F} \int_{E_C}^{\infty} \frac{dE}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (43)$$

сделаем замену переменных (формула (16) в [2])

$$\eta \equiv \frac{E - E_C}{kT}, \quad \eta_F \equiv \frac{E_F - E_C}{kT}, \quad (44)$$

так что

$$\langle M \rangle = g_v \frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^{\infty} \frac{d\eta}{e^{\eta - \eta_F} + 1}. \quad (45)$$

выражается через интеграл Ферми–Дирака 0-го порядка $\mathfrak{Z}_0(\eta_F)$ [5]. Дифференцирование его по параметру (формула (19) в [2]) даёт

$$\langle M \rangle = g_v \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F), \quad (46)$$

так что искомая проводимость

$$G = \frac{2q^2}{h} \langle M \rangle = \frac{2q^2}{h} g_v \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F). \quad (47)$$

Для невырожденных проводников $\eta_F \ll 0$ и $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) \rightarrow e^{\eta_F}$. Для сильно вырожденных проводников $\eta_F \gg 0$. Интеграл Ферми–Дирака $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$, как аналитическая функция, —

$$\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) = \frac{\partial \mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{\partial \eta_F} = \frac{\partial [\ln(e^{\eta_F} + 1)]}{\partial \eta_F} = \frac{e^{\eta_F}}{e^{\eta_F} + 1}. \quad (48)$$

Для сильно вырожденного проводника ($\eta_F \gg 0$) $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) \rightarrow 1$ и

$$G = \frac{2q^2}{h} g_v, \quad (49)$$

как и ожидалось.

Зная G и $R = 1/G$, вычислим теперь коэффициенты Соре и Зеебека.

Из (14) и (39) следует, что

$$S_T = -\frac{k}{q} \int_{E_C}^{\infty} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \left[\frac{2q^2}{h} g_v \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \right] dE. \quad (50)$$

Разделим и умножим это выражение на проводимость согласно (40). Тогда

$$S_T = -\frac{k}{q} G \frac{\int_{E_C}^{\infty} [(E - E_F) / kT] (-\partial f_0 / \partial E) dE}{\int_{E_C}^{\infty} (-\partial f_0 / \partial E) dE}. \quad (51)$$

Коэффициент $S_{\text{оре}}$ пропорционален проводимости. Остаётся вычислить два интеграла. Интеграл в знаменателе равен $\mathfrak{I}_{-1}(\eta_F)$. Это очевидно из сравнения (46) с (41). Интеграл в числителе преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int_{E_C}^{\infty} [(E - E_F) / kT] (-\partial f_0 / \partial E) dE = \\ & = \int_{E_C}^{\infty} [(E - E_C + E_C - E_F) / kT] (-\partial f_0 / \partial E) dE = \\ & = \int_{E_C}^{\infty} (E - E_C / kT) (+\partial f_0 / \partial E_F) dE - \eta_F \int_{E_C}^{\infty} (+\partial f_0 / \partial E_F) dE, \quad (52) \end{aligned}$$

где использовалось равенство (42). Выносим $\partial / \partial E_F$ из-под знака интеграла и делаем замену переменных (44). Тогда числитель в (51) оказывается равным

$$\begin{aligned} & \int_{E_C}^{\infty} [(E - E_F) / kT] (-\partial f_0 / \partial E) dE = \\ & = \frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^{\infty} \frac{\eta d\eta}{e^{\eta - \eta_F} + 1} - \eta_F \frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^{\infty} \frac{d\eta}{e^{\eta - \eta_F} + 1} = \mathfrak{I}_0(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{I}_{-1}(\eta_F). \quad (53) \end{aligned}$$

Окончательно коэффициент $S_{\text{оре}}$ (51)

$$S_T = -\frac{k}{q} \left(-\eta_F + \frac{\mathfrak{I}_0(\eta_F)}{\mathfrak{I}_{-1}(\eta_F)} \right) G. \quad (54)$$

Поскольку коэффициенты $S_{\text{оре}}$ и Зеебека связаны друг с другом через проводимость соотношением (31), то коэффициент Зеебека

$$S = -\frac{k}{q} \left(-\eta_F + \frac{\mathfrak{I}_0(\eta_F)}{\mathfrak{I}_{-1}(\eta_F)} \right) \quad (55)$$

или иначе

$$S = -\frac{k}{q} \left(\frac{E_C - E_F}{kT} + \delta \right), \quad (56)$$

где

$$\delta = \frac{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)}. \quad (57)$$

Коэффициент Зеебека получился таким же, как и ожидалось согласно формуле (15) в [3] с

$$\delta = \Delta / kT. \quad (58)$$

В невырожденном пределе ($\eta_F \ll 0$) интегралы Ферми–Дирака становятся просто экспонентами с $\delta \rightarrow 1$ и $\Delta \rightarrow kT$.

В невырожденном 1D-баллистическом резисторе ток идёт по единственной моде с энергией приблизительно на kT выше дна зоны проводимости. Для сильно вырожденных резисторов ($\eta_F \gg 0$) $\delta \rightarrow \eta_F = (E_F - E_C) / kT$, и согласно (56) $S \rightarrow 0$, а $\Delta \rightarrow (E_F - E_C)$, что намного больше кванта тепловой энергии kT , характерного для невырожденных резисторов.

Итак, для 1D-баллистического резистора вычислены G , R , S_T , S , Π . Перейдём к вычислению электронной теплопроводности K_0 и K . Следуем той же процедуре, что и при вычислении коэффициента Соре. После умножения и деления теплопроводности K_0 (25) на проводимость (40) имеем:

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 G \frac{\int_{E_C}^{\infty} [(E - E_F) / kT]^2 (-\partial f_0 / \partial E) dE}{\int_{E_C}^{\infty} (-\partial f_0 / \partial E) dE}. \quad (59)$$

Сразу видим, что теплопроводность пропорциональна проводимости (закон Видемана–Франца). Как и в коэффициенте Соре (51), интеграл в знаменателе равен $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$. Остаётся разобраться с интегралом в числителе. Он равен

$$\begin{aligned} & \int_{E_C}^{\infty} \left[\frac{E - E_F}{kT} \right]^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \int_{E_C}^{\infty} \left[\frac{(E - E_C) + (E_C - E_F)}{kT} \right]^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \\ & = \int_{E_C}^{\infty} \left[\frac{E - E_C}{kT} \right]^2 \left(\frac{\partial f_0}{\partial E_F} \right) dE - 2\eta_F \int_{E_C}^{\infty} \left[\frac{E - E_C}{kT} \right] \left(\frac{\partial f_0}{\partial E_F} \right) dE + (\eta_F)^2 \int_{E_C}^{\infty} \left(\frac{\partial f_0}{\partial E_F} \right) dE. \end{aligned} \quad (60)$$

В последнем равенстве справа третье слагаемое есть $(\eta_F)^2 \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$, второе слагаемое равно $-2\eta_F \mathfrak{Z}_0(\eta_F)$, а первое есть $2\mathfrak{Z}_1(\eta_F)$, так что электронная теплопроводность в условиях короткозамкнутой цепи

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 G \left[2 \frac{\mathfrak{Z}_1(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)} - 2\eta_F \frac{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)} + (\eta_F)^2 \right]. \quad (61)$$

Электронная теплопроводность в условиях незамкнутой цепи K даётся выражением (33), и с учётом (32) и (55) окончательно имеем:

$$K = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 G \left[2 \frac{\mathfrak{Z}_1(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)} - \left(\frac{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)} \right)^2 \right]. \quad (62)$$

Аналогичным образом можно получить аналитические выражения для термоэлектрических параметров для резисторов любой размерности, любого масштаба и любых режимов работы. Если подобные выкладки кажутся слишком скучными, вполне можно прибегнуть к численному интегрированию, что обычно достаточно для сравнения с экспериментальными данными.

В заключение настоящего обзора приведём окончательные аналитические выражения для термоэлектрических коэффициентов резисторов с параболической дисперсией всех размерностей, в том числе и для случая диффузионного режима со степенным законом рассеяния

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r. \quad (63)$$

Аналогичные аналитические выражения приведём и для линейной дисперсии в графене, которому будет посвящена отдельная публикация.

8. ЗАКОН ВИДЕМАНА–ФРАНЦА И ЧИСЛА ЛОРЕНЦА

Электроны переносят как заряд, так и тепло. Выпишем связь между электронной проводимостью и теплопроводностью в явном виде. Для этого нам потребуется процедура усреднения по удельной проводимости

$$\sigma = \int \sigma'(E) dE, \quad (64)$$

а именно,

$$\langle\langle (*) \rangle\rangle \equiv \frac{\int (*) \sigma'(E) dE}{\int \sigma'(E) dE}. \quad (65)$$

Умножаем и делим удельное значение коэффициента $C_{\text{оре}}$ (27) на удельную проводимость; тогда

$$s_T = -\left(\frac{k}{q}\right) \sigma \left\langle \frac{E - E_F}{kT} \right\rangle. \quad (66)$$

Аналогично поступаем с коэффициентом Зеебека (37). Тогда с учётом (14) из работы [3]

$$S = \frac{s_T}{\sigma} = -\left(\frac{k}{q}\right) \left\langle \frac{E - E_F}{kT} \right\rangle = -\left(\frac{k}{q}\right) \frac{E_{av} - E_F}{kT}, \quad (67)$$

и мы видим, что коэффициент Зеебека пропорционален среднему значению энергии выше уровня Ферми, при которой течёт ток.

Для удельной теплопроводности (28) и (38) имеем:

$$\kappa_0 = T \left(\frac{k}{q}\right)^2 \sigma \left\langle \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \right\rangle, \quad (68)$$

$$\kappa = T \left(\frac{k}{q}\right)^2 \sigma \left[\left\langle \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{E - E_F}{kT} \right\rangle^2 \right]. \quad (69)$$

Обе теплопроводности пропорциональны электронной проводимости. Отсюда

$$\frac{\kappa}{T\sigma} \equiv L = \left(\frac{k}{q}\right)^2 \left[\left\langle \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{E - E_F}{kT} \right\rangle^2 \right], \quad (70)$$

есть закон Видемана–Франца, а L — число Лоренца. Множитель в квадратных скобках зависит от профиля зон, вырожденности и характера рассеяния. Для типичного полупроводника с параболической дисперсией и с постоянным средним значением длины свободного пробега этот множитель приблизительно равен 2 для невырожденного проводника или $\pi^2 / 3$ — для вырожденного [3].

9. ПОЛУПРОВОДНИКИ p -ТИПА И БИПОЛЯРНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

Рассмотрим $3D$ -полупроводник с параболической дисперсией. Для зоны проводимости

$$M_{3D}(E) = (2\pi\hbar^2)^{-1} g_v m^* (E - E_c) \quad (E \geq E_c), \quad (71)$$

а для валентной зоны

$$M_{3D}^{(v)}(E) = (2\pi\hbar^2)^{-1} g_v m_p^* (E_v - E) \quad (E \leq E_v). \quad (72)$$

Проводимость обеспечивается двумя вкладками. Со стороны зоны проводимости

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (73)$$

и со стороны валентной зоны

$$\sigma_p = \frac{q^2}{h} \int_{-\infty}^{E_v} M_{3D}^v(E) \lambda_p(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (74)$$

Коэффициент Зеебека для электронов зоны проводимости следует из (27):

$$\sigma = \int_{E_c}^{\infty} \sigma'(E) dE, \quad (75a)$$

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}(E - E_c) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (75б)$$

$$s_T = -\frac{k}{q} \int_{E_c}^{\infty} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE, \quad (75в)$$

$$S = \frac{s_T}{\sigma} \quad (75г)$$

и по аналогии для электронов валентной зоны

$$\sigma_p = \int_{-\infty}^{E_v} \sigma'_p(E) dE, \quad (76a)$$

$$\sigma'_p(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}^v(E_v - E) \lambda_p(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (76б)$$

$$s_T^{(v)} = -\frac{k}{q} \int_{-\infty}^{E_v} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'_p(E) dE, \quad (76в)$$

$$S_p = \frac{s_T^{(v)}}{\sigma_p}, \quad (76г)$$

причём знак S_p положителен.

В чем проявляются особенности, когда обе зоны дают вклад в проводимость? Это встречается в узкозонных полупроводниках или при высоких температурах. В этом случае мы просто интегрируем по всем модам проводимости:

$$\sigma^{\text{tot}} \equiv \sigma + \sigma_p = \frac{q^2}{h} \int_{E_1}^{E_2} M_{3D}^{\text{tot}}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (77a)$$

$$M_{3D}^{\text{tot}}(E) = M_{3D}(E) + M_{3D}^v(E); \quad (77b)$$

при этом нет нужды заботиться об интегрировании до верхнего предела зоны проводимости или от самого дна валентной зоны, поскольку фермиевские функции гарантируют экспоненциальное падение до нуля на границах зон. Биполярная проводимость даётся суммой вкладов от обеих мод проводимости с соответствующими значениями $\lambda(E)$ в нужных нам пределах энергий (рис. 4).

Биполярная проводимость σ^{tot} физически обеспечивается электронами и описывается общим уравнением (77): нет нужды менять знаки для валентной зоны или заменять f_0 на $1 - f_0$.

Каким будет коэффициент Зеебека в режиме биполярной проводимости?

Вспомним, что при вычислении транспортных коэффициентов вклады от всех мод проводимости складываются. Для коэффициента Соре в случае биполярной проводимости имеем:

$$s_T^{\text{tot}} = -\frac{k}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE = S\sigma + S_p\sigma_p, \quad (78)$$

тогда коэффициент Зеебека в режиме биполярной проводимости

$$S^{\text{tot}} = \frac{S\sigma + S_p\sigma_p}{\sigma + \sigma_p}; \quad (79)$$

коэффициенты Зеебека для электронов валентной зоны и зоны про-

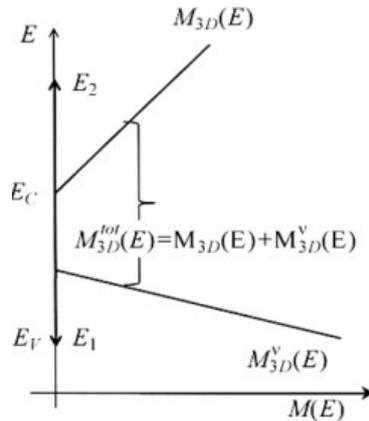


Рис. 4. К вычислению биполярной проводимости.

водимости имеют противоположные знаки, так что в режиме bipolarной проводимости суммарный коэффициент Зеебека близок к нулю и добротность [3] ТЭ устройства резко падает.

10. ТРАНСПОРТНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ 3D-ПРОВОДНИКОВ В ДИФФУЗИОННОМ РЕЖИМЕ

В заключение получим транспортные коэффициенты (36)–(38) для массивных 3D-диффузионных резисторов для транспортных уравнений (34) и (35). Начнём с удельного сопротивления (36). Удельную проводимость

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} \int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (80)$$

перепишем следующим образом:

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} \left[\frac{\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} \right] \int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (81)$$

Знаменатель есть среднее число мод в фермиевском окне проводимости вблизи уровня Ферми

$$\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \equiv \langle M_{3D} \rangle. \quad (82)$$

Выражение в квадратных скобках

$$\frac{\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} = \frac{\langle M_{3D} \lambda(E) \rangle}{\langle M_{3D} \rangle} \equiv \langle \langle \lambda \rangle \rangle \quad (83)$$

есть средняя длина свободного пробега, усреднённая по всем модам в окне проводимости. Таким образом, вычисление удельной проводимости 3D-диффузионного резистора сводится к вычислению среднего числа мод в окне проводимости и усреднённого по этим модам средней длины свободного пробега:

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} \langle M_{3D} \rangle \langle \langle \lambda \rangle \rangle. \quad (84)$$

Для параболической дисперсии (71) из (82) имеем:

$$\begin{aligned} \langle M_{3D} \rangle &= g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} kT \int_{E_c}^{\infty} \left(\frac{E - E_c}{kT} \right) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \\ &= M_{3D}(kT) \int_{E_c}^{\infty} \eta \left(+\frac{\partial f_0}{\partial \eta_F} \right) d\eta = M_{3D}(kT) \mathfrak{Z}_0(\eta_F), \end{aligned} \quad (85)$$

где $M_{3D}(kT)$ это выражение (71), вычисленное при $E - E_c = kT$, а новые переменные определены в (44).

Усреднённое значение $\langle \lambda \rangle$ по (83) вычислим для степенного закона рассеяния (63), в котором показатель степени r принимает разные значения для разных механизмов рассеяния [6]. Числитель в (83) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} &\int_{E_c}^{\infty} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \\ &= \int_{E_c}^{\infty} g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} (E - E_c) \lambda_0 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^r \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = \\ &= M_{3D}(kT) \lambda_0 \Gamma(r + 2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) \end{aligned} \quad (86)$$

Поскольку знаменатель в (83) есть $\langle M_{3D} \rangle$ по (85), то

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0 \Gamma(r + 2) \frac{\mathfrak{Z}_r(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}, \quad (87)$$

а проводимость (84) с учётом (85)

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} M_{3D}(kT) \mathfrak{Z}_0(\eta_F) \left[\lambda_0 \Gamma(r + 2) \frac{\mathfrak{Z}_r(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)} \right]. \quad (88)$$

Итак, вычислили удельную проводимость и далее удельное сопротивление ρ по (36). Теперь вычислим коэффициент Зеебека по (37) и (27). С учётом (63) коэффициент Зеебека даётся уравнением (56) с

$$\delta = \frac{\int \left(\frac{E - E_c}{kT} \right) \sigma'(E) dE}{\int \sigma'(E) dE} = (r + 2) \frac{\mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_r(\eta_F)}. \quad (89)$$

Более общее определение этого параметра есть (формула (25) в [3])

$$\delta = \frac{E_{av} - E_c}{kT}. \quad (90)$$

Рассмотрим невырожденный предел ($\eta_F \ll 0$). Оба интеграла Ферми–Дирака в (89) становятся просто e^{η_F} и $\delta = r + 2$. При $r = 0$ параметр $\delta = 2$ и согласно (90) это означает, что ток течёт при средней энергии на $2kT$ выше дна зоны проводимости E_C . При $r > 0$ средняя длина свободного пробега (63) растёт с ростом энергии, в результате чего ток течёт при более высокой энергии и соответственно увеличивается коэффициент Зеебека. Для $r = 2$, что характерно для рассеяния на ионизированных примесях, $\delta = 4$ и ток течёт при средней энергии на $4kT$ выше E_C .

Остаётся вычислить удельную теплопроводность (38) или иначе число Лоренца (70):

$$L = \frac{\kappa}{T\sigma} = \left(\frac{k}{q}\right)^2 \left\{ (r+2)(r+3) \frac{\mathfrak{F}_{r+2}(\eta_F)}{\mathfrak{F}_r(\eta_F)} - \left[(r+2) \frac{\mathfrak{F}_{r+1}(\eta_F)}{\mathfrak{F}_r(\eta_F)} \right]^2 \right\}. \quad (91)$$

Этот частный результат полезно сравнить с общим выражением (70), которое не предполагает параболическую дисперсию и степенной закон рассеяния.

В невырожденном пределе $r = 0$, и выражение в фигурных скобках есть просто 2, как и ожидалось (формула (22) в [3]). В вырожденном пределе ($\eta_F \gg 0$) можно воспользоваться разложением интегралов Ферми–Дирака в ряд [5] и показать, что выражение в фигурных скобках равно $\pi^2/3$.

11. КОЭФФИЦИЕНТ ЗЕЕБЕКА В ВЫРОЖДЕННОМ ПРЕДЕЛЕ: ФОРМУЛА МОТТА

Коэффициент Зеебека (56) с параметром δ по (89) справедлив для параболической дисперсии и степенного закона рассеяния. В невырожденном пределе интегралы Ферми–Дирака становятся просто экспонентой, в результате чего выражение для коэффициента Зеебека упрощается до

$$S = -\left(\frac{k}{q}\right) [(r+2) - \eta_F]. \quad (92)$$

Упростить коэффициент Зеебека можно и в сильно вырожденном пределе ($\eta_F \gg 0$) следующим образом. В этом пределе интеграл Ферми–Дирака порядка r аппроксимируется рядом [5]

$$\mathfrak{F}_r(\eta_F) \approx \frac{(\eta_F)^{r+1}}{\Gamma(r+2)} + \frac{(\eta_F)^{r-1}}{\Gamma(r)} \zeta(2) + \dots, \quad (93)$$

где $\zeta(2) = \pi^2/6$ есть дзета-функция Римана. Воспользуемся этим разложением для коэффициента Зеебека (56) с параметром δ по (89)

$$S = -\frac{k}{q} \left[(r+2) \frac{\mathfrak{I}_{r+1}(\eta_F)}{\mathfrak{I}_r(\eta_F)} - \eta_F \right] \quad (94)$$

и найдём

$$S \approx -\frac{k}{q} \left[\frac{2(r+1)\eta_F \zeta(2)}{(\eta_F)^2 + r(r+1)\zeta(2)} \right], \quad (95)$$

что в сильно выраженном пределе ($\eta_F = 0$) даёт

$$S \approx -\frac{k}{q} \left[\frac{2(r+1)\zeta(2)}{\eta_F} \right]. \quad (96)$$

Мы видим из уравнения (92), что в невырожденном пределе

$$|S| \propto -\eta_F \quad (\eta_F \ll 0), \quad (97)$$

а из уравнения (96) в вырожденном пределе

$$|S| \propto 1 / \eta_F \quad (\eta_F \gg 0). \quad (98)$$

Наконец, вспомним, что

$$\sigma'(E) \propto M_{3D}(E) \lambda(E) \propto (E - E_C)^{r+1}, \quad (99)$$

откуда

$$\frac{1}{\sigma'(E)} \frac{d\sigma'(E)}{dE} \Big|_{E=E_F} = \frac{r+1}{E_F - E_C}. \quad (100)$$

Подставляя в (96) $\zeta(2)$ и $r+1$ из (100) получаем, наконец, известное соотношение Мотта для коэффициента Зеебека:

$$S \approx -\frac{\pi^2 k^2 T}{3q} \left[\frac{\partial \ln \sigma'(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F}, \quad (101)$$

которое широко используется для вырожденных полупроводников. Для получения этого соотношения мы воспользовались уравнением (94), для которого предполагается параболическая зонная структура и степенной закон рассеяния. Этот же результат можно получить и из более общих соображений, если воспользоваться известным разложением Зоммерфельда [7, 8].

Подведём итоги. В нашу задачу входило получить строгие результаты, сформулированные без доказательства в [3], для 1D-, 2D- и 3D-проводников с произвольной дисперсией и любого масштаба в

режимах от баллистического до диффузионного. Было показано с подробными выкладками как получаются термоэлектрические коэффициенты для 1D-баллистического транспорта и для 3D-диффузионного. Основным объектом обсуждения были n -проводники, вместе с тем показали каким образом распространить результаты на p -проводники. Рассмотрели биполярную проводимость, закон Видемана–Франца и числа Лоренца, соотношение Мотта. Процессы рассеяния учитывали феноменологически. В коэффициенте прохождения $T(E) = \lambda(E) / [\lambda(E) + L]$ среднюю длину свободного пробега описывали степенным законом.

В заключение в справочных целях собраны воедино в Приложении термоэлектрические коэффициенты для 1D-, 2D- и 3D-полупроводников с параболической дисперсией [6, 9].

ПРИЛОЖЕНИЕ. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ 1D-, 2D- И 3D-ПРОВОДНИКОВ С ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ ДИСПЕРСИЕЙ

В приведённых ниже формулах предполагается параболическая зонная структура

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

и степенной закон рассеяния

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E}{kT} \right)^r.$$

Положение уровня Ферми E_F относительно дна зоны проводимости E_C определяется параметром

$$\eta_F = \frac{E_F - E_C}{kT}.$$

Там, где это возможно, указаны номера формул из основного текста, хотя они и могут быть там записаны несколько иначе.

1. Термоэлектрические коэффициенты для 1D-баллистических резисторов:

$$G = \frac{2q^2}{h} \mathfrak{I}_{-1}(\eta_F) \quad (47); \quad S_T = -\frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} [\mathfrak{I}_0(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{I}_{-1}(\eta_F)] \quad (54);$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{\mathfrak{I}_0(\eta_F)}{\mathfrak{I}_{-1}(\eta_F)} - \eta_F \right] \quad (55);$$

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left[2\mathfrak{Z}_1(\eta_F) - 2\eta_F \mathfrak{Z}_0(\eta_F) + \eta_F^2 \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) \right] \quad (61);$$

$$K = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left[2\mathfrak{Z}_1(\eta_F) - \frac{\mathfrak{Z}_0^2(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)} \right] \quad (62).$$

2. Термоэлектрические коэффициенты для 1D-диффузионных резисторов:

$$G = \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+1) \mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F);$$

$$S_T = -\frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+1) \left[(r+1) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F) \right];$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{(r+1) \mathfrak{Z}_r(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F)} - \eta_F \right];$$

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \times$$

$$\times \left[\Gamma(r+3) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r+1) \mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F) \right];$$

$$K = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+2) \left[(r+2) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) - \frac{(r+1) \mathfrak{Z}_r^2(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F)} \right].$$

Проводимость $G = \sigma_{1D} / L$ приведена в Сименсах: $[\sigma_{1D}] = 1 \text{ См} \cdot \text{м}$.

Аналогично для остальных коэффициентов: $s_T = S_T L$; $\kappa_0 = K_0 L$; $\kappa = KL$.

3. Термоэлектрические коэффициенты для 2D-баллистических резисторов:

$$G = W \frac{2q^2}{h} \frac{\sqrt{2\pi m^* kT}}{h} \mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F);$$

$$S_T = -W \frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} \frac{\sqrt{2\pi m^* kT}}{h} \left[\frac{3}{2} \mathfrak{Z}_{1/2}(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F) \right];$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{3\mathfrak{Z}_{1/2}(\eta_F)}{2\mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F)} - \eta_F \right];$$

$$K_0 = W T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \frac{\sqrt{2\pi m^* kT}}{h} \left[\frac{15}{4} \mathfrak{Z}_{3/2}(\eta_F) - 3\eta_F \mathfrak{Z}_{1/2}(\eta_F) + \eta_F^2 \mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F) \right];$$

$$K = WT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \frac{\sqrt{2\pi m^* kT}}{h} \left[\frac{15}{4} \mathfrak{I}_{3/2}(\eta_F) - \frac{9\mathfrak{I}_{1/2}^2(\eta_F)}{4\mathfrak{I}_{-1/2}(\eta_F)} \right].$$

4. Термоэлектрические коэффициенты для 2D-диффузионных резисторов:

$$G = W \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi h} \Gamma \left(r + \frac{3}{2} \right) \mathfrak{I}_{r-1/2}(\eta_F);$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{(r + 3/2) \mathfrak{I}_{r+1/2}(\eta_F)}{\mathfrak{I}_{r-1/2}(\eta_F)} - \eta_F \right];$$

$$S_T = -W \frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi h} \left[\Gamma \left(r + \frac{5}{2} \right) \mathfrak{I}_{r+1/2}(\eta_F) - \eta_F \Gamma \left(r + \frac{3}{2} \right) \mathfrak{I}_{r-1/2}(\eta_F) \right];$$

$$K_0 = WT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi h} \times \\ \times \left[\Gamma \left(r + \frac{7}{2} \right) \mathfrak{I}_{r+3/2}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma \left(r + \frac{5}{2} \right) \mathfrak{I}_{r+1/2}(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma \left(r + \frac{3}{2} \right) \mathfrak{I}_{r-1/2}(\eta_F) \right];$$

$$K = WT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi h} \Gamma \left(r + \frac{5}{2} \right) \times \\ \times \left[\left(r + \frac{5}{2} \right) \mathfrak{I}_{r+3/2}(\eta_F) - \frac{\left(r + \frac{3}{2} \right) \mathfrak{I}_{r+1/2}^2(\eta_F)}{\mathfrak{I}_{r-1/2}(\eta_F)} \right].$$

Проводимость $G = \sigma_{2D} W / L$ приведена в Сименсах: $[\sigma_{2D}] = 1 \text{ См}$.

Аналогично для остальных коэффициентов: $s_T = S_T L / W$; $\kappa_0 = K_0 L / W$; $\kappa = KL / W$.

5. Термоэлектрические коэффициенты для 3D-баллистических резисторов:

$$G = A \frac{2q^2}{h} \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \mathfrak{I}_0(\eta_F); \quad S_T = -A \frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} [2\mathfrak{I}_1(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{I}_0(\eta_F)];$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{2\mathfrak{I}_1(\eta_F)}{\mathfrak{I}_0(\eta_F)} - \eta_F \right];$$

$$K_0 = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} [6\mathfrak{I}_2(\eta_F) - 4\eta_F \mathfrak{I}_1(\eta_F) + \eta_F^2 \mathfrak{I}_0(\eta_F)];$$

$$K = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \left[6\mathfrak{Z}_2(\eta_F) - \frac{4\mathfrak{Z}_1^2(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)} \right].$$

6. Термоэлектрические коэффициенты для 3D-диффузионных резисторов:

$$G = A \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F);$$

$$S = -\frac{k}{q} \left[\frac{(r+2)\mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_r(\eta_F)} - \eta_F \right] \quad (94);$$

$$S_T = -A \frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \left[\Gamma(r+3) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) - \eta_F \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) \right];$$

$$K_0 = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2}$$

$$\left[\Gamma(r+4) \mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r+3) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) \right];$$

$$K = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \Gamma(r+3) \left[(r+3) \mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) - \frac{(r+2)\mathfrak{Z}_{r+1}^2(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_r(\eta_F)} \right];$$

Проводимость $G = \sigma_{3D} A / L$ приведена в Сименсах: $[\sigma_{3D}] = 1 \text{ См/м}$.

Аналогично для остальных коэффициентов: $s_T = S_T L / A$; $\kappa_0 = K_0 L / A$; $\kappa = KL / A$.

Благодарю проф. Марка Лундстрема за возможность прослушать его курс лекций, частично положенный в основу при написании настоящего обзора, на тему ‘Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications’ [6], прочитанный в 2011 г. в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

Я также благодарен Н. Е. Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, № 3: 519 (2013); *ibidem*, **12**, № 2: 415 (2014).
2. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, № 4: 655 (2013).
3. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **12**, № 3: 601 (2014).
4. M. Lundstrom and J. Guo, *Nanoscale Transistors: Physics, Modeling, and Simulation* (Berlin: Springer: 2006).
5. R. Kim and M. S. Lundstrom, *Notes on Fermi–Dirac Integrals* (2011),

- arXiv:0811.0116v4 [cond-mat.mes-hall]; www.nanohub.org/resources/5475.
6. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
 7. A. Sommerfeld, *Z. Phys.*, **47**, No. 1: 1 (1928).
 8. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела* (Москва: Мир: 1979) (пер. с англ.).
 9. Ra Seong Kim, *Physics and Simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices* (West Lafayette: Purdue University: 2011).

REFERENCES

1. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 3: 519 (2013); *ibidem*, **12**, No. 2: 415 (2014).
2. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 4: 655 (2013).
3. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **12**, No. 3: 601 (2014).
4. M. Lundstrom and J. Guo, *Nanoscale Transistors: Physics, Modeling, and Simulation* (Berlin: Springer: 2006).
5. R. Kim and M. S. Lundstrom, *Notes on Fermi–Dirac Integrals* (2011), arXiv:0811.0116v4 [cond-mat.mes-hall]; www.nanohub.org/resources/5475.
6. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
7. A. Sommerfeld, *Z. Phys.*, **47**, No. 1: 1 (1928).
8. N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Fizika Tverdogo Tela* [Solid State Physics] (Moscow: Mir: 1979) (Russian translation).
9. Ra Seong Kim, *Physics and Simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices* (West Lafayette: Purdue University: 2011).