
ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS numbers: 63.22.-m, 65.80.-g, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 73.50.Lw, 74.25.fg, 84.60.Rb, 85.80.Fi

ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, E-mail: quantumnet@yandex.ua

* Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна
тел. (044) 526 0532, E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У методичній статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, з позицій концепції «знизу – вгору» узагальненої транспортної моделі Ландауера – Датта – Лундстрома послідовно виведені основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами (провідність, коефіцієнти Зеєбека і Пельт'є, коефіцієнт термодифузії Сорє й електронна теплопровідність для короткозамкнутого кола) для 1D провідників у балістичному режимі провідності й для 3D провідників у дифузійному режимі для довільного закону дисперсії й для будь-якого масштабу напівпровідника.

Розрахунки здійснено для n-напівпровідників, але водночас показано, як розповсюдити результати також і на p-напівпровідники. Окремо розглянуто біполярну провідність, закон Відемана – Франца, співвідношення Мотта. При цьому процеси розсіювання електронів враховано феноменологічно: середню довжину вільного пробігу апроксимовано степеневим законом. У Додатку наведено вирази для термоелектричних коефіцієнтів для 1D, 2D і 3D напівпровідників з параболічним законом дисперсії.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, термоелектричні коефіцієнти, інтеграли Фермі – Дірака

THERMOELECTRIC COEFFICIENTS IN GENERALIZED ELECTRON TRANSPORT MODEL APPROACH

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. On the basis of the «bottom – up» approach of Landauer – Datta – Lundstrom transport model the basic equations of thermoelectricity with the corresponding transport coefficients (conductivity, Seebeck and Peltier coefficients, Soret thermal diffusion coefficient, and electronic thermal conductivity for short-circuit case) for 1D conductors in the ballistic regime and 3D conductors in the diffusion regime with an arbitrary dispersion and for any size were strictly derived in the tutorial article for researchers, university teachers, and students.

The examination was carried for n-semiconductors, the method how to generalize results for p-semiconductors case is also presented. The bipolar conductivity, Wiedemann – Franz law, and Mott correlation were discussed as well. The electron scattering processes were considered phenomenologically: the mean free pass was approximated by power law. In Appendix the thermoelectric coefficients for 1D, 2D, and 3D semiconductors with parabolic dispersion are presented.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, thermoelectric coefficients, Fermi – Dirac integrals

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ В ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ТРАНСПОРТА ЭЛЕКТРОНОВ

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В методической статье, рассчитанной на исследователей, преподавателей, студентов высшей школы с позиций концепции «снизу – вверх» транспортной модели Ландауэра – Датты – Лундстрема строго выведены основные уравнения термоэлектричества с соответствующими транспортными коэффициентами (проводимость, коэффициенты Зеебека и Пельтье, коэффициент термической диффузии Соре, коэффициент электронной теплопроводности для короткозамкнутой цепи) для 1D проводников в баллистическом режиме и для 3D проводников в диффузионном режиме с произвольной дисперсией и любого масштаба.

Расчеты произведены для n-полупроводников, в то же время показано, как распространить результаты на p-полупроводники. Отдельно рассмотрены биполярная проводимость, закон Видемана-Франца. Приведены термоэлектрические коэффициенты для 1D, 2D и 3D проводников с параболической дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах.

Ключевые слова: нанофизика, нанoeлектроника, термоэлектрические коэффициенты,

1. Вступ. У серії навчально-оглядових статей, які друкувалися в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології», починаючи з №4 за 2012 рік, автори у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№4, 2012) [1], термоелектричні явища (№1, 2013), основи спітроніки (№2, 2013) та застосування методу нерівноважної функції Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3, 4, 2013), класичний та квантовий ефекти Холла (№1, 2014), спіновий ефект Холла (№2, 2014), роль квантової інтерференції та дефазування (№3, 2014), роль електростатики і контактів (№4, 2014), рівноважну термодинаміку провідника зі струмом (№ 2, 2015).

Продовжуючи знайомити вітчизняних викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, із сучасною концепцією викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), до певної міри альтернативною традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках, ми розглянули в [2] модель Ландауера – Датта – Лундстрома (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту не тільки в режимі лінійного відгуку, але й у високовольтному режимі гарячих електронів, для нелокального і квантового транспорту, транспорту в неупорядкованих і наноструктурованих матеріалах, у резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних.

При цьому розгляд у [1, 2] здійснювався для випадку, коли температура контактів резистора однакова. У [3] натомість ми розглянули термоелектричні (ТЕ) ефекти Зеєбека і Пельтьє в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана – Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами.

У цій статті ми отримуємо доведення для результатів, постульованих у [3], причому зробимо це для 1D, 2D і 3D провідників з довільним законом дисперсії і будь-яким режи-

мом провідності: балістичним, дифузійним, або ж перехідним. Докладно ми зупинимося на термоелектричних коефіцієнтах для 1D балістичного транспорту і для 3D дифузійного. Головним об'єктом обговорення стануть *n*-провідники, але разом із цим ми продемонструємо, як розповсюдити результати на *p*-провідники.

У рамках моделі ЛДЛ ми послідовно розглянемо біполярну провідність, закон Відемана – Франца, співвідношення Мотта. На завершення ми наведемо зведення виразів для термоелектричних коефіцієнтів для 1D, 2D і 3D напівпровідників з параболічною дисперсією в балістичному режимі, а також у дифузійному зі ступеневим законом розсіяння, записаних через стандартні інтеграли Фермі – Дірака.

2. «Рушійні сили» для електричного струму. Загальний вираз для електричного струму [1, 2]

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

де $T(E)$ – коефіцієнт проходження, а $M(E)$ – число мод провідності, демонструє, що будь-які причини, які спричиняють відмінність між фермівськими функціями контактів провідника, породжують струм. Знак « \rightarrow » у цьому виразі означає, що струм вважається додатним, коли він входить у контакт 2 ззовні (рис. 5 [3]) в напрямку від'ємної напівосі x , електрони при цьому рухаються у провіднику від контакту 1 до контакту 2 в напрямку додатної напівосі x .

Розрізняють дві «рушійні сили», які народжують струм: різниця потенціалів і різниця температур контактів. Електрони переносять як заряд, так і тепло. Зарядовий струм визначається рівнянням (1). Для отримання загального виразу для теплового потоку (термоструму) врахуємо подальше. Електрони всередині контакту рухаються при енергії $E \approx E_F$. Щоб зайти в моду провідності $M(E)$ резистора з боку витоку S , електрон повинен буде виділи-

ти ($E_F > E$), а з боку стоку D – поглинути ($E_F < E$) теплову енергію $|E - E_F|$. Вираз для теплового потоку можна отримати просто внесенням $(E - E_F)/q$ під знак інтегралу в (1) – адже в цьому випадку переноситься вже не заряд q , а енергія $|E - E_F|$. Тож для термоструму в кінцевому підсумку маємо:

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

Вирази (1) і (2) – це загальні вирази для зарядового струму й теплового потоку. Далі ми перейдемо до розгляду струму в режимі лінійного відгуку $f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E) \approx f_0(E)$ [1].

На рис. 1 показано хід фермівських функцій $f_1 > f_2$ при однаковій температурі контактів і $\Delta V = V_2 - V_1 > 0$ (струм додатний).

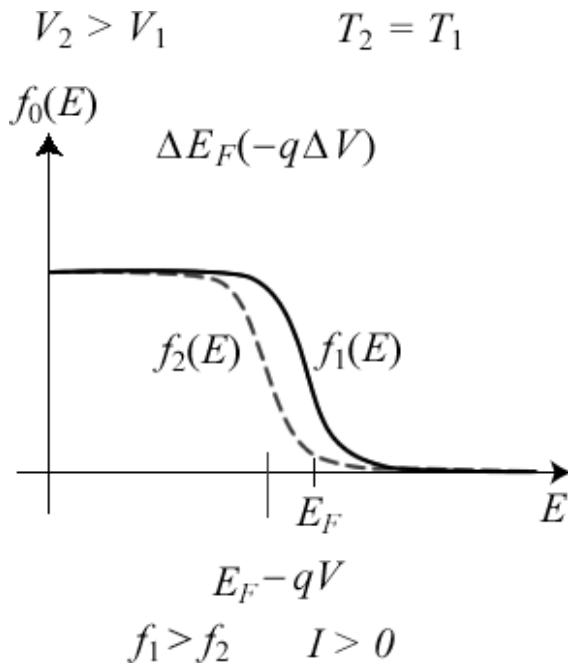


Рис. 1. Якісний хід фермівських функцій, коли прикладено різницю потенціалів до контактів, що мають однакову температуру.

У цьому випадку знак струму не залежить від того, чи йдеться про n -провідник, чи про p -провідник. У режимі лінійного відгуку [1]:

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

і фермівське вікно провідності завширшки приблизно $2kT$, у якому похідна $-\partial f_0 / \partial E$ відмінна від нуля в околі рівноважного значення електрохімічного потенціалу $E = E_{F0}$, «фільтрує» електрони й пропускає в провідник лише ті, енергія яких лежить у межах вікна.

Рис. 2 демонструє ситуацію, коли електрохімічні потенціали контактів однакові ($E_{F1} = E_{F2}; V_2 = V_1$), але температура цих контактів різна, причому $\Delta T = T_2 - T_1 > 0$.

$$V_2 = V_1 \quad T_2 > T_1$$

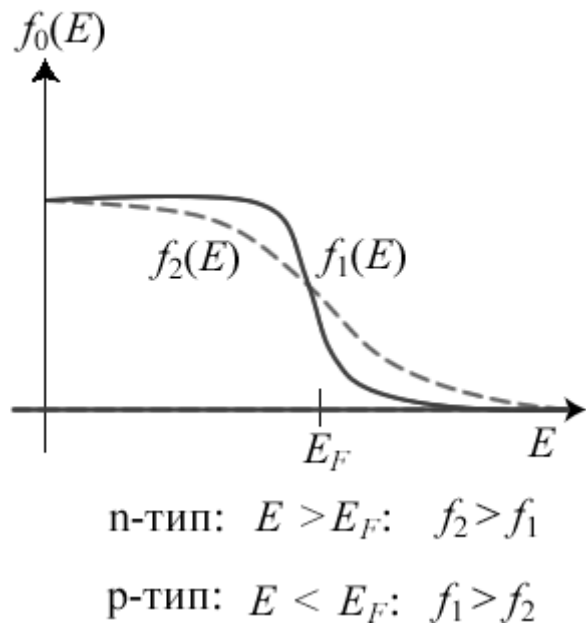


Рис. 2. Якісний хід фермівських функцій без прикладання різниці потенціалів до контактів, які перебувають при різних температурах.

У цьому випадку $f_1 > f_2$ для енергій електронів нижче від рівня Фермі ($E < E_F$) і $f_1 < f_2$ для енергій електронів вище від рівня Фермі ($E > E_F$).

Напрямок струму залежить від того, як розташовані моди провідності провідника: якщо нижче від рівня Фермі (p -провідник), то струм

від'ємний (електрони рухаються від контакту 2 до контакту 1). У режимі лінійного відгуку розкладемо різницю фермівських функцій у ряд Тейлора й обмежимося членом першого порядку:

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

Диференціювання функції Фермі за температурою (ф-ла (28) в [1]) дає:

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

де $T = (T_1 + T_2) / 2$.

Дію обох рушійних сил – і різниці електростатичних потенціалів, і різниці температур контактів – проілюстровано рис. 3.

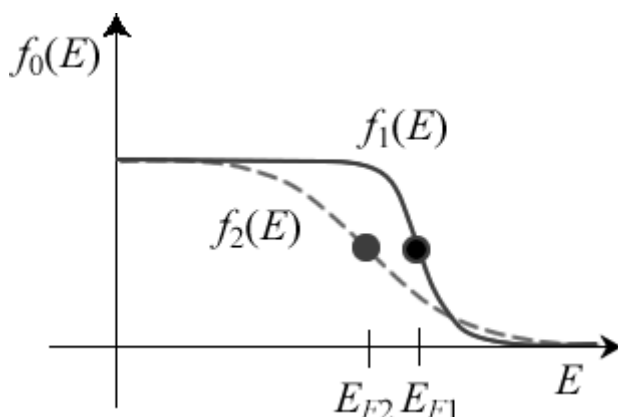


Рис. 3. Якісний хід фермівських функцій, коли прикладено різницю потенціалів до контактів, які мають різні температури.

В режимі лінійного відгуку ефекти від обох «сил» просто додаються:

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

3. Електричний струм. Остаточний вираз для сумарного струму є сумою вкладів від усіх мод провідності:

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

де струм у диференціальній формі дорівнює

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

Підставляючи до (8) різницю фермівських функцій (6), одержуємо

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

де

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

– диференціальна провідність, а

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

– коефіцієнт Соре термодифузії в диференціальній формі. Видно, що він від'ємний для енергій електронів вище від енергії Фермі (*n*-провідники) і додатний для енергій електронів нижче від енергії Фермі (*p*-провідники).

Залишається проінтегрувати диференціальний струм (7). Остаточного ми отримуємо:

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

де провідність

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

а коефіцієнт Соре термодифузії

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

Обидва ці рівняння справедливі для провідників будь-якої вимірності й будь-якого масштабу в режимах від балістичного через квазі-балістичний до дифузійного.

4. Струм у масивних провідниках. Струм у масивних провідниках у режимі дифузійного транспорту описується виразами (1) – (3) роботи [3]. При цьому вираз (2) для густини струму, вираженої через електричне поле (3), справедливий для однорідних провідників без

урахування коефіцієнта дифузії. Як переписати ці вирази за наявності різниці температур на контактах?

Використаємо рівняння (12). Нагадаємо, що в цьому рівнянні додатний струм скерований у бік від'ємної напівосі x (рис. 5 у [3]). Поділивши струм на переріз провідника й змінивши знак на протилежний, одержимо густину струму в напрямку додатної напівосі x :

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

Поділимо й помножимо цей вираз на довжину провідника L . Тоді

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

В дифузійному режимі

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

і, за аналогією,

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

де s_T – питоме значення термодифузійного коефіцієнта Соре. З урахуванням того, що $-q\Delta V/L \approx d(E_F)/dx$ і $\Delta T/L \approx dT/dx$, отримаємо шуканий вираз для густини струму в масивному провіднику з урахуванням градієнту не тільки електрохімічного потенціалу, але й температури:

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

Для n -провідників провідність додатна, а коефіцієнт Соре від'ємний. Для p -провідників і електронна провідність, і коефіцієнт Соре додатні. До детального розгляду провідності в n - і p -провідниках ми ще повернемося.

5. Перенесення тепла електронами. Потіки тепла на контактах визначаються виразом (2). Перепишемо його в диференціальній формі

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

Тоді тепловий потік дорівнюватиме:

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

В режимі лінійного відгуку для різниці фермівських функцій скористаємося виразом (6), а також виразами (10) і (11) для диференціальних провідності $G'(E)$ й коефіцієнта Соре $S'_T(E)$. Тоді

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

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

Інтегрування за всім спектром енергій дає:

$$I_Q = -T S_T \Delta V - K_0 \Delta T, [Bm] \quad (24)$$

де

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

– електронна теплопровідність в умовах короткого замикання в колі ($\Delta V = 0$).

Отже, з загальних виразів для електричного струму (1) й теплового потоку (2) ми отримали відповідні вирази (12) і (24) для режиму лінійного відгуку. Ці вирази показують, що наявність різниці електрохімічних потенціалів і температур контактів призводить до появи зарядового струму й теплового потоку, зумовлених переміщенням електронів. Цьому режимі відповідають три транспортні параметри: провідність G (13), коефіцієнт термодифузії Соре S_T (14) й електронна теплопровідність K_0 (25). Вони справедливі для провідників будь-якої вимірності й для режимів від балістичного до дифузійного.

Для 3D-провідника в дифузійному режимі електричний струм описується транспортним

рівнянням (19). Густина теплового потоку визначається рівнянням

$$J_{Qx} = T s_T \frac{d(E_F / q)}{dx} - \kappa_0 \frac{dT}{dx} \cdot [Bm/M^2] \quad (26)$$

Транспортними параметрами в рівняннях (19) і (26) є питома електрична провідність σ , питома значення термодифузійного коефіцієнта S та κ_0 й питома теплопровідність, які можуть бути записані через диференціальну електричну провідність $\sigma'(E)$:

$$\sigma = \int \sigma'(E) dE = \frac{2q^2}{h} \langle M_{3D} \rangle \langle \lambda \rangle,$$

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), [1/Ом \cdot м \cdot Дж]$$

$$s_T = -\frac{k}{q} \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE, [A/m \cdot K] \quad (27)$$

$$\kappa_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \sigma'(E) dE. [Bm/m \cdot K] \quad (28)$$

Відзначмо, що рівняння (19) і (26) справедливі й для 1D та 2D провідників, але коефіцієнти, що до них входять, матимуть інші розмірності.

6. Узагальнена форма транспортних рівнянь. Пари рівнянь для електричних струмів (12) і потоків тепла (24), і для їхніх густин (19) і (26) було отримано із загальних рівнянь (1) і (2) у наближенні режиму лінійного відгуку. Вони відповідають тій експериментальній ситуації, коли для заданої різниці потенціалів і температур вимірюють електричний струм і потік тепла. Але якщо різницю потенціалів і різницю температур можна підтримувати незалежно одна від одної, то електричний струм і потік тепла, зумовлені переміщенням електронів, взаємопов'язані. Тому всі вклади від різних мод провідності має бути підсумовано. З точки зору експерименту може бути зручно переписати ці рівняння, зробивши незалежними величинами електричний струм і різницю

температур. Тоді видозмінені рівняння (12) і (24) матимуть вигляд:

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

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

де

$$S = S_T / G, \quad (31)$$

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

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

Але при цьому вклади від різних мод провідності вже підсумовуванню не підлягають: наприклад, опір $R \neq \int R(E) dE$.

Для 3D провідника в дифузійному режимі перетворення рівнянь (19) і (26) дає подальшу пару рівнянь:

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

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

з транспортними коефіцієнтами

$$\rho = 1 / \sigma, \quad (36)$$

$$S = s_T / \sigma, \quad (37)$$

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

Часто використовують рівняння (34) з лівою частиною, записаною через електричне поле.

7. Транспортні коефіцієнти для 1D провідників. Розглянемо в балістичному режимі 1D провідник з лишень однією підзоною з електронами. Розрахуємо його транспортні параметри з загальних рівнянь (12) і (24), або ж (29) і (30). В нашому випадку коефіцієнт проходження $T(E) = 1$ і число мод провідності $M(E) = g_v$, де g_v для напівпровідника – долинне виродження. Хоча ми вважаємо, що електрони є тільки в одній підзоні, однак, у залежності від зонної структури, g_v може не дорівнювати одиниці. Наприклад, у вуглецевих нанотрубках, які часто розглядають як ідеаль-

ні 1D провідники, $g_v = 2$ [4]. Те ж саме значення g_v має місце і для графенових нанострічок.

Для обчислення провідності звернімося до виразу для диференціальної провідності (10). У нашому випадку

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

тому повна провідність становитиме

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

Інтеграл у цьому виразі дорівнює числу мод провідності. Для гранично виродженого випадку $T = 0 K$ одержуємо $\langle M \rangle = g_v$. Натомість у загальному випадку

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

де використано властивість фермівської функції

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

Для обчислення правого інтегралу в (41)

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

виконаємо заміну змінної інтегрування й запровадимо параметр η_F :

$$\eta \equiv (E - E_C) / kT; \quad \eta_F \equiv (E_F - E_C) / kT, \quad (44)$$

Тоді

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

виражається через інтеграл Фермі – Дірака [5]

0-го порядку $\mathfrak{Z}_0(\eta_F)$. Диференціювання його за параметром η_F дає:

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

тому провідність

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

Для невироджених провідників $\eta_F < 0$ і, як наслідок, $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) \rightarrow e^{\eta_F}$. Для сильно вироджених провідників $\eta_F \gg 0$. Для інтегралу Фермі – Дірака $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$ як аналітичної функції має місце співвідношення:

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

Для випадку $\eta_F \gg 0$ маємо $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) \rightarrow 1$ і

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

як і слід було очікувати.

Знаючи G і $R = 1/G$, обчислимо тепер коефіцієнти Соре і Зеебека. З (14) і (39) випливає, що

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

Розділимо й помножимо цей вираз на провідність згідно з (40). Тоді

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

і коефіцієнт Соре пропорційний провідності. Залишається обчислити два інтеграли. Інтеграл у знаменнику дорівнює $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$, – це видно з порівняння (46) з (41). Інтеграл у чисельнику перетворюється так:

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

де використано рівність (42). Винесемо $\partial / \partial E_F$ з-під знаку інтеграла й зробимо заміну змінних (44). Тоді чисельник у (51) дорівнюватиме

$$\int_{E_c}^{\infty} [(E - E_F) / kT] (-\partial f_0 / \partial E) dE =$$

$$= \frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^{\infty} \frac{\eta d\eta}{e^{\eta - \eta_F} + 1} - \eta_F \frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^{\infty} \frac{d\eta}{e^{\eta - \eta_F} + 1} = \mathfrak{Z}_0(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F). \quad (53)$$

Остаточно коефіцієнт S_{ore} (51) дорівнює:

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

Оскільки коефіцієнти S_{ore} і Зеєбека пов'язані один з одним через провідність співвідношенням (31), то коефіцієнт Зеєбека дорівнюватиме

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

або ж інакше

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

де

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

Коефіцієнт Зеєбека вийшов таким самим, як і можна було очікувати згідно з (15) у [3] з

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

Справді, у випадку невідродженого напівпровідника ($\eta_F < 0$) інтеграли Фермі – Дірака стають просто експонентами з $\delta \rightarrow 1$ і $\Delta \rightarrow kT$.

В невідродженому 1D балістичному резисторі струм проходить по єдиній моді з енергією приблизно на kT вище від дна зони провідності. Натомість для сильно вироджених резисторів ($\eta_F \gg 0$) $\delta \rightarrow \eta_F = (E_F - E_C) / kT$, і, у відповідності до (56) $S \rightarrow 0$, а $\Delta \rightarrow (E_F - E_C)$, що набагато перевищує квант теплової енергії kT , характерний для невідроджених резисторів.

Отже, для 1D балістичного резистора ми розрахували величини G, R, S_T, S, P . Тепер перейдемо до обчислення зумовленої переміщенням електронів теплопровідності K_0 і K .

Дотримуватимемося тієї ж послідовності, що й при обчисленні коефіцієнта S_{ore} . Після множення і ділення теплопровідності K_0 (25) на провідність (40) одержуємо:

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

Ми зразу бачимо, що теплопровідність пропорційна провідності (закон Відемана – Франца). Як і для коефіцієнта S_{ore} (51), інтеграл у знаменнику дорівнює $\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$. Залишається обчислити інтеграл у чисельнику:

$$\int_{E_c}^{\infty} [(E - E_F) / kT]^2 (-\partial f_0 / \partial E) dE =$$

$$= \int_{E_c}^{\infty} [(E - E_C) + (E_C - E_F) / kT]^2 (-\partial f_0 / \partial E) dE =$$

$$= \int_{E_c}^{\infty} [(E - E_C) / kT]^2 (+\partial f_0 / \partial E_F) dE - \quad (60)$$

$$- 2\eta_F \int_{E_c}^{\infty} [(E - E_C) / kT] (+\partial f_0 / \partial E_F) dE +$$

$$+ (\eta_F)^2 \int_{E_c}^{\infty} (+\partial f_0 / \partial E_F) dE.$$

Останній доданок дорівнює $(\eta_F)^2 \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)$, другий – $-2\eta_F \mathfrak{Z}_0(\eta_F)$, а перший – $2\mathfrak{Z}_1(\eta_F)$, тож електронна провідність у короткозамкненому колі становитиме:

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

Електронна теплопровідність у розімкнутому колі K визначається виразом (33); з урахуванням (32) і (55) остаточно одержуємо:

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

Аналогічно можна отримати аналітичні вирази для термоелектричних параметрів для резисторів будь-якої вимірності, будь-яких масштабів і за будь-яких режимів роботи. Замість аналітичних викладок нескладно застосувати чисельне інтегрування, що зазвичай і роблять для порівняння з експериментальними даними.

На завершення нашої статті ми наведемо зведені аналітичні вирази для термоелектричних коефіцієнтів резисторів з параболічним законом дисперсії всіх вимірностей, зокрема

й для випадку дифузійного режиму зі степеневим законом залежності довжини вільного пробігу від енергії електрона

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

Аналогічні аналітичні вирази ми наведемо й для лінійного закону дисперсії в графені, якому буде присвячено окрему публікацію.

8. Закон Відемана – Франца й числа Лоренца. Електрони переносять і заряд, і тепло. Випишемо зв'язок між електронною провідністю й теплопровідністю в явному вигляді. Для цього нам потрібна буде процедура усереднення певної фізичної величини (*) за питомою провідністю

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

а саме:

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

Помножимо й поділимо питомих значення коефіцієнта Соре (27) на питому провідність. Тоді

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

Аналогічно чинимо з коефіцієнтом Зеєбека (37). Тоді з урахуванням виразу (14) зі статті [3] одержуємо:

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

З цього виразу ми бачимо, що коефіцієнт Зеєбека пропорційний середньому значенню енергії, з якою переміщуються носії струму, відрахованої від рівня Ферми.

Для питомої теплопровідності (28) і (38) ми одержуємо:

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

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

Обидві теплопровідності пропорційні електронній провідності. Звідси одержуємо:

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

Цей вираз є записом закону Відемана – Франца, де L – число Лоренца. Множник у квадратних дужках залежить від профілю зон, ступеня виродження й характеру розсіювання. Для типового напівпровідника з параболічним законом дисперсії і зі сталим значенням довжини вільного пробігу цей множник приблизно дорівнює 2 для невиродженого провідника, або ж $\pi^2 / 3$ для виродженого [3].

9. Напівпровідники p -типу й біполярна провідність. Розглянемо 3D провідник з параболічною дисперсією. Для зони провідності число мод провідності дорівнює

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

а для валентної зони -

$$M_{3D}^{(v)}(E) = g_p \frac{m_p^*}{2\pi\hbar^2} (E_V - E). \quad (E \leq E_V). \quad (72)$$

Загальна провідність забезпечується двома вкладками: електронів у зоні провідності

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

й у валентній зоні

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

Коефіцієнт Зеєбека для електронів зони провідності може бути отримано з (27):

$$\sigma = \int_{E_C}^{\infty} \sigma'(E) dE,$$

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

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

$$S = s_T / \sigma, \quad (75)$$

й за аналогією для валентної зони

$$\sigma_p = \int_{-\infty}^{E_V} \sigma'_p(E) dE,$$

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

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

$$S_p = s_T^{(v)} / \sigma_p,$$
(76)

причому знак S_p додатний.

Якщо в провідність роблять вклад обидві зони (таке зазвичай має місце у вузькощільних напівпровідниках, де «власна» провідність, зумовлена термічним перекиданням електронів із валентної зони в зону провідності, переважає «домішкову», зумовлену іонізацією домішкових рівнів), ми, інтегруючи за всіма модами провідності, одержуємо:

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

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

При цьому немає потреби інтегрувати від верхньої межі зони провідності до нижньої межі валентної зони: похідна від фермівської функції розподілу (фермівське вікно провідності) забезпечать експоненційне падіння підінтегрального виразу до нуля з віддаленням його від рівня Фермі, то ж для достатньо віддалених від рівня Фермі меж інтегрування E_1 і E_2 значення інтегралу від них уже не залежатиме. Біполярна провідність є сумою вкладів від обох чисел мод провідності, при цьому $\lambda(E)$ у відповідних енергетичних інтервалах набуває значень $\lambda(E)$ у зоні провідності й $\lambda_p(E)$ у валентній зоні (рис. 4).

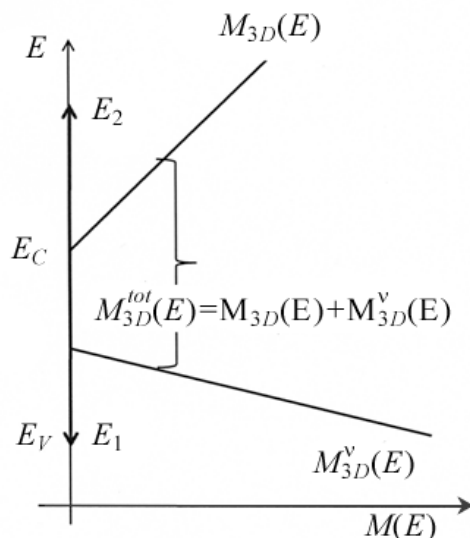


Рис. 4. До обчислення біполярної провідності.

Біполярна провідність σ^{tot} фізично забезпечується електронами й описується загальним виразом (77): у цьому формалізмі немає потреби застосовувати поняття «дірок» і замінити для них f_0 на $1 - f_0$.

Яким буде коефіцієнт Зеебека в режимі біполярної провідності?

Пригадаємо той факт, що при обчисленні транспортних коефіцієнтів вклади від усіх мод провідності додаються. Для коефіцієнта Соре у випадку біполярної провідності маємо:

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

тоді як коефіцієнт Зеебека в тому ж режимі біполярної провідності дорівнюватиме:

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

Звернімо увагу на те, що коефіцієнти Зеебека для електронів валентної зони й зони провідності мають протилежні знаки, тож у режимі біполярної провідності сумарний коефіцієнт Зеебека близький до нуля й добротність [3] термоелектричного пристрою різко спадає.

10. Транспортні коефіцієнти для 3D провідників у дифузійному режимі. Насамкінець отримаємо транспортні коефіцієнти (36) – (38) для масивних 3D дифузійних резисторів

для транспортних рівнянь (34) і (35). Почнімо з питомого опору (36). Питому провідність

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

перепишемо таким чином:

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

Знаменник у цьому виразі – це середнє число мод у фермівському вікні провідності поблизу рівня Фермі:

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

Вираз у квадратних дужках

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

– це середня довжина вільного пробігу, усереднена за всіма модами у вікні провідності. Таким чином, обчислення питомої провідності 3D дифузійного резистора зводиться до обчислення середнього числа мод у вікні провідності й усередненої за цими модами середньої довжини вільного пробігу:

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

Для числа мод, записаного для випадку параболічного закону дисперсії (71), з (82) одержуємо:

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

де $M_{3D}(kT)$ – це вираз (71), обчислений для $E - E_C = kT$, а нові змінні визначені в (44).

Усереднене значення $\langle \lambda \rangle$ згідно з (83) обчислимо для степеневі залежності довжини вільного пробігу (63), у якій показник степені r набуває різних значень для різних механізмів розсіяння [6]. Чисельник у (83) перетвориться таким чином:

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

Оскільки знаменник у (83) $\in \langle M_{3D} \rangle$ згідно з (85), то

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

а провідність (84) з урахуванням (85) дорівнюватиме:

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

Знаючи питому провідність, ми знаємо й обернений до неї питомий опір ρ (36). Тепер обчислимо коефіцієнт Зеєбека згідно з (37) та (27). З урахуванням (63) коефіцієнт Зеєбека визначається виразом (56), де

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

Нагадаємо більш загальне визначення цього параметра (ф-ла (25) у [3]):

$$\delta = (E_{av} - E_C) / kT. \quad (90)$$

Розглянемо невироджений випадок ($\eta_F < 0$). Обидва інтеграли Фермі – Дірака в (89) дорівнюють при цьому просто e^{η_F} , і, отже, $\delta = r+2$. При $r=0$ параметр $\delta=2$ і згідно з (90) це означає, що струм переносять електрони із середньою енергією, приблизно на $2kT$ вищою від дна зони провідності E_C . При $r > 0$ середня довжина вільного пробігу (63) зростає зі збільшенням енергії, і внаслідок цього струм переносять носії з вищою середньою енергією, і відповідно зростає коефіцієнт Зеєбека. Для $r=2$, що характерне для розсіювання на іонізованих домішках, $\delta=4$, і струм переносять носії з середньою енергією, що вища від дна зони провідності на $4kT$.

Залишається обчислити питому теплопровідність (38), або ж пов'язане з нею число Лоренца (70):

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

Цей частковий результат корисно порівняти з загальним виразом (70), який не передбачає параболічного закону дисперсії і степеневого закону розсіювання. В невідродженому випадку $r=0$ і вираз у фігурних дужках дорівнює просто 2, як і слід було очікувати (ф-ла (22) у [3]). У виродженому випадку ($\eta_F \gg 0$) можна розкласти інтеграли Фермі – Дірака в ряд [5] й показати, що вираз у фігурних дужках дорівнює $\pi^2/3$.

11. Коефіцієнт Зеебека у виродженому випадку: формула Мотта. Вираз для коефіцієнту Зеебека (56) з параметром δ (89) справедливий для параболічного закону дисперсії й степеневого закону розсіювання. У невідродженому випадку інтеграли Фермі–Дірака перетворюються просто на експоненти, і внаслідок цього вираз для коефіцієнту Зеебека спрощується:

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

Спростити коефіцієнт Зеебека можна й для сильно виродженого випадку ($\eta_F \gg 0$). Для цього випадку інтеграл Фермі–Дірака порядку r апроксимується рядом [5]

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

де $\zeta(2) = \pi^2/6$ – дзета-функція Рімана. Використаємо цей розклад для коефіцієнту Зеебека (56) з параметром δ (89):

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

й одержимо:

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

У сильно виродженому випадку ($\eta_F \gg 0$) цей вираз спрощується до

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

З виразу (92), ми бачимо, що в невідродженому випадку

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

а з (96) – що у сильно виродженому випадку

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

Нарешті, згадаємо, що

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

звідки

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

Підставляючи в (96) $\zeta(2)$ і $r+1$ з (100), одержуємо, врешті-решт, відоме співвідношення Мотта для коефіцієнту Зеебека:

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

яке широко застосовують для вироджених напівпровідників. Для його одержання ми використали вираз (94), справедливий для параболічної зонної структури й степеневого закону розсіювання. Цей самий результат можна отримати також із загальніших міркувань, використавши відомий розклад Зоммерфельда [7, 8].

12. Аналіз експериментальних даних для Ge: коефіцієнт Зеебека й термоелектричні коефіцієнти. На рис. 5 зображено залежність коефіцієнтів Зеебека для Ge n - і p -типу при кімнатній температурі від розташування рівня Фермі E_F щодо дна зони провідності E_C .

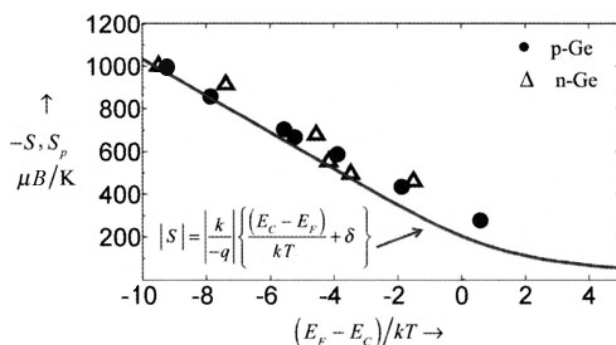


Рис. 5. Коефіцієнт Зеебека для Ge n - і p -типу при $T=300$ K: експериментальні точки [9], розрахункова крива [6].

Покажемо, що експериментальні результати узгоджуються з виразом (56) і вказують на те, що поправка δ (58) мала й стала для невідроджених напівпровідників. Покажемо також, що поправка δ зростає мірою віддалення рівня Фермі від дна зони провідності. Розглянемо також ситуацію для p -напівпровідників.

Згідно з (56) коефіцієнт Зеєбека $|S|$ повинен спадати лінійно з ростом E_F , якщо тільки поправка δ (58) стала. Цей висновок підтверджують експериментальні дані (рис. 5). Так,

$$|S| = 86 \times (-\eta_F + \delta), \text{ мкВ/К} \quad (102)$$

де η_F визначено у (44). При $\eta_F = -10$ величина $|S| \approx 1000 \text{ мкВ/К}$, звідки випливає, що $\delta \approx 2$, виходячи з наведених вище простих міркувань для невідроджених напівпровідників.

Якщо поправка δ була б увесь час стала, то коефіцієнт Зеєбека мав би змінити знак при $E_F > E_c + 2kT$. Насправді цього не відбувається (рис. 5), що вказує на те, що поправка δ повинна збільшуватися мірою того, як рівень Фермі піднімається все вище в зоні провідності. При $\eta_F = 4$ коефіцієнт Зеєбека $|S| \approx 50 \text{ мкВ/К}$ (рис. 5), що відповідає $\delta \approx 4.6$, а це вдвічі перевищує значення поправки для невідродженого випадку. Як було показано в [3], поправка

$$\delta = (E_{av} - E_c) / kT, \quad (103)$$

де E_{av} – середнє значення енергії, з якою рухаються носії струму щодо дна зони провідності. У сильно вроджених провідниках $E_{av} \rightarrow E_F$, так що $\delta \rightarrow \eta_F$ і $S \rightarrow 0$ при $E_F \gg E_c$.

Для n -провідників коефіцієнт Зеєбека (за модулем) тим більший, чим нижче розташований рівень Фермі щодо дна зони провідності. Знак коефіцієнта Зеєбека від'ємний. У p -провідниках коефіцієнт Зеєбека тим більший, чим вище розташований рівень Фермі щодо стелі валентної зони, й знай його додатний. Струмові рівняння (4) і (5)

для n -провідників у [3] при переході до p -провідників не змінюються, а коефіцієнт Зеєбека запишеться так:

$$\frac{d(E_F^{(p)} / q)}{dx} = \rho_p J_{px} + S_p \frac{dT}{dx}, \quad (104)$$

$$S_p(T) = \left(\frac{k}{+q} \right) \left(\frac{E_F^{(p)} - E_v}{kT} + \delta_p \right),$$

де $\delta_p = (E_v - E_{av}) / kT$ – додатне число, яке вказує, наскільки нижчою від стелі валентної зони є середня енергія «дірок», які переносять струм. Як ми вже бачили вище, в умовах біполярної провідності вклад у коефіцієнт Зеєбека роблять і електрони, і «дірки». Врахування цієї обставини важливе для діапазону високих температур, а також для вузькощілинних напівпровідників, де концентрація власних електронів і «дірок» може суттєво перевищити концентрацію домішкових центрів, які забезпечують легування кристалу.

Оцінимо термоелектричні коефіцієнти для слабколегованого n -Ge при кімнатній температурі. Відомо, що для цього матеріалу при $T = 300\text{K}$ рухливість $\mu = 3200 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, а рівноважна концентрація носіїв струму $n_0 \approx N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [10]. Нагадаємо також, що для невідроджених напівпровідників справедливе просте співвідношення між концентрацією носіїв струму й енергією рівня Фермі, а саме [10]:

$$n_0 = N_c e^{(E_F - E_c) / kT}, \quad (105)$$

де «ефективна густина станів» для Ge при кімнатній температурі $N_c = 1.09 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [10].

Основні вирази термоелектрики для масивного зразка (34) і (35) містять чотири транспортні коефіцієнти: питомий опір ρ (36), коефіцієнт Зеєбека S (37), електронну теплопровідність κ (38) і коефіцієнт Пельть'є $\pi = TS$ (співвідношення Кельвіна).

Наявні значення параметрів дозволяють оцінити питому провідність $\sigma = n_0 q \mu$, звідси питомий опір $\rho \approx 2 \Omega \cdot \text{см}$.

Коефіцієнт Зеєбека (56) залежить від розташування рівня Фермі. З (105) одержуємо:

$$\frac{E_c - E_F}{kT} = \ln \frac{N_c}{n_0} \approx 9.3. \quad (106)$$

У припущенні $\delta = 2$ для коефіцієнта Зеєбека отримуємо $S \approx -970 \text{ мкВ/К}$.

Коефіцієнт Пельть'є знайдемо зі співвідношення Кельвіна: $\pi = -0.3 \text{ Вм/А}$.

Електронну теплопровідність знайдемо через число Лоренца [3]:

$$\kappa = T\sigma L. \quad (107)$$

Оскільки в нашому випадку йдеться про слабколегований 3D напівпровідник із майже квадратичним законом дисперсії, то, згідно з [3], ми можемо вважати, що число Лоренца для невиродженого випадку дорівнює

$$L \approx 2(k/q)^2, \text{ і звідси } \kappa \approx 2.2 \times 10^{-4} \text{ Вм/м} \cdot \text{К}.$$

Ми розглянули доволі простий приклад. Але надалі нам корисно буде подумати над тим, як зміняться наведені вище значення термоелектричних коефіцієнтів Ge, якщо температура знизиться до 77 К , або ж якщо температура залишиться кімнатною, але легування зросте до 10^{20} см^3 . Потрібно також пам'ятати, що ґратка так само проводить тепло (цю фонову теплопровідність ми розглянемо в наступній статті). Важливо, що фононна теплопровідність Ge при кімнатній температурі становить $58 \text{ Вм/м} \cdot \text{К}$, що на п'ять порядків більше від оціненої вище електронної теплопровідності. Однак у сильно легованих напівпровідниках за низьких температур вклад електронів у теплопровідність може бути суттєвий. І, очевидно, він завжди переважає в металах.

Підведемо підсумки цієї статті. Нашим завданням було отримати строгі результати, сформульовані без доведення в [3], для 1D, 2D і 3D провідників з довільним законом дисперсії й будь-яким масштабом у режимах провідності від балістичного й до дифузійного. Ми докладно показали, як одержувати термоелектричні коефіцієнти для 1D балістичного транспорту й для 3D дифузійного транспорту. Викладки було здійснено для n -напівпровідників, але водночас було показано, як розповсюдити результати також і на p -напівпровідники. Ми окремо розглянули біполярну провідність, за-

кон Відемана – Франца й числа Лоренца, співвідношення Мотта. При цьому процеси розсіювання електронів ми враховували феноменологічно: у коефіцієнті проходження $T(E) = \lambda(E)/[\lambda(E) + L]$ середню довжину вільного пробігу ми апроксимували степеневим законом.

З довідковою метою ми наводимо в Додатку вирази для термоелектричних коефіцієнтів для 1D, 2D і 3D напівпровідників з параболічним законом дисперсії [6, 11].

На завершення наголосимо: стаття є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications», прочитаних он-лайн в 2011 році проф. Марком Лундстромом (Mark Lundstrom), а також «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts», прочитаних он-лайн в 2012 і 2015 роках проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Авторі щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Додаток. Термоелектричні коефіцієнти для 1D, 2D і 3D напівпровідників з параболічним законом дисперсії. У наведених нижче формулах вважається, що дисперсія електронів описується квадратичним законом (за нуль відліку обрано енергію дна зони провідності):

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

і що справедлива степенева апроксимація для залежності середньої довжини вільного пробігу від енергії:

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

Розташування рівня Фермі E_F щодо дна зони провідності E_C описується параметром

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

1. Термоелектричні коефіцієнти для 1D балістичних резисторів

$$G = \frac{2q^2}{h} \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F);$$

$$S_T = -\frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} [\mathfrak{Z}_0(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F)];$$

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

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

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

2. Термоелектричні коефіцієнти для 1D дифузійних резисторів

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

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

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

$$K_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) [\Gamma(r+3) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r+1) \mathfrak{Z}_{r-1}(\eta_F)];$$

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

Провідність $G = \sigma_{1D} / L$ має вимірність *Сіменсів*, звідси вимірність питомої провідності $[\sigma_{1D}] = 1 \text{См} \cdot \text{м}$. Аналогічно для решти коефіцієнтів:

$$S_T = S_T L; \quad \kappa_0 = K_0 L; \quad \kappa = KL.$$

3. Термоелектричні коефіцієнти для 2D балістичних резисторів

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

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

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

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

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

4. Термоелектричні коефіцієнти для 2D дифузійних резисторів

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

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

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

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

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

Провідність $G = \sigma_{2D} W / L$ вимірюється в *Сіменсах*; звідси вимірність питомої провідності $[\sigma_{2D}] = 1 \text{См}$. Аналогічно для решти коефіцієнтів:

$$S_T = S_T L / W; \quad \kappa_0 = K_0 L / W; \quad \kappa = KL / W.$$

5. Термоелектричні коефіцієнти для 3D балістичних резисторів

$$G = A \frac{2q^2}{h} \frac{m^* kT}{2\pi \hbar^2} \mathfrak{Z}_0(\eta_F);$$

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

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

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

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

6. Термоелектричні коефіцієнти для 3D дифузійних резисторів

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

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

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

$$\kappa_0 = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} [\Gamma(r+4)\mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r+3)\mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r+2)\mathfrak{Z}_r(\eta_F)];$$

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

Провідність $G = \sigma_{3D} A / L$ має вимірність *Сіменсів*, звідси питома провідність має вимірність $[\sigma_{3D}] = 1 \text{См} / \text{м}$. Аналогічно для решти коефіцієнтів:

$$S_T = S_T L / A; \quad \kappa_0 = K_0 L / A; \quad \kappa = K L / A.$$

Список використаної літератури

1. Yu. O. Kruhlyak, N. Yu. Kruhlyak, M. V. Strikha, Uroky nanoelektroniky: Vynyknennya strumu, formulyuvannya zakonu Oma i mody providnosti v kontseptsiyi «znyzu – vhoru», Sens. elektron. mikrosist. tehnol., 9, 4, 5 – 29, 2012 .
2. Yu. O. Kruhlyak, M. V. Strikha, Uzahal'na model' elektronnoho transportu v mikro- i nanoelektronitsi, Sens. elektron. mikrosist. tehnol., 12, 3, 4 – 27, 2015 .
3. Yu. O. Kruhlyak, M. V. Strikha, Termoelektrychni yavysysha ta prystroyi z pozytsiy uzahal'nenoyi modeli transportu elektroniv, Sens. elektron. mikrosist. tehnol., 12, 4, 5, 2015 .
4. Mark Lundstrom, Jing Guo. Nanoscale

Transistors: Physics, Modeling, and Simulation (Berlin: Springer: 2006).

5. R. Kim, M. S. Lundstrom. Notes on Fermi - Dirac Integrals, arXiv:0811. 0116; www.nanohub.org/resources/5475 .
6. M. Lundstrom, C. Jeong, Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013; www.nanohub.org/resources/11763).
7. A. Sommerfeld. An electronic theory of the metals based on Fermi's statistics. Z. Phys., 47, № 1: 1 (1928).
8. N. Ashcroft, N. Mermin. Fizika tverdogo tela, (M: Mir: 1979).
9. T. N. Geballe, G. W. Hull, Seebeck Effect in Germanium, Phys. Rev. , 94, 1134 (1954).
10. R. F. Pierret, Semiconductor Device Fundamentals (Reading, MA: Addison-Wesley: 1996).
11. Ra Seong Kim. Physics and Simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices (West Lafayette: Purdue University: 2011).
12. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 473; 2012: www.nanohub.org/courses/FoN1; 2015: www.edx.org/school/purdue).

Стаття надійшла до редакції 18.12.2015 р.

THERMOELECTRIC COEFFICIENTS IN GENERALIZED ELECTRON TRANSPORT MODEL APPROACH

*Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha**

Odessa State Environmental University

E-mail: quantumnet@yandex.ua"

** Taras Shevchenko National University of Kyiv*

E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

Summary

On the basis of the «bottom – up» approach of Landauer – Datta – Lundstrom transport model the basic equations of thermoelectricity with the corresponding transport coefficients (conductivity, Seebeck and Peltier coefficients, Soret thermal diffusion coefficient, and electronic thermal conductivity for short-circuit case) for 1D conductors in the ballistic regime and 3D conductors in the diffusion regime with an arbitrary dispersion and for any size were strictly derived in the tutorial article for researchers, university teachers, and students.

The examination was carried for n -semiconductors, the method how to generalize results for p -semiconductors case is also presented. The bipolar conductivity, Wiedemann – Franz law, and Mott correlation were discussed as well. The electron scattering processes were considered phenomenologically: the mean free pass was approximated by power law. In Appendix the thermoelectric coefficients for 1D, 2D, and 3D semiconductors with parabolic dispersion are presented.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, thermoelectric coefficients, Fermi – Dirac integrals

PACS numbers: 63.22.-m, 65.80.-g, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 73.50.Lw, 74.25.fg, 84.60.Rb, 85.80.Fi

ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна
тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*

* Київський національний університет ім. Т. Шевченка, факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна
тел. (044) 526 0532, *E-mail: maksym_strikha@hotmail.com*

Реферат

У методичній статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, з позицій концепції «знизу-вгору» узагальненої транспортної моделі Ландауера-Датта-Лундстрома послідовно виведені основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами (провідність, коефіцієнти Зеєбека і Пельт'є, коефіцієнт термодифузії Сорє й електронна теплопровідність для короткозамкнутого кола) для 1D провідників у балістичному режимі провідності й для 3D провідників у дифузійному режимі для довільного закону дисперсії й для будь-якого масштабу напівпровідника.

Розрахунки здійснено для *n*-напівпровідників, але водночас показано, як розповсюдити результати також і на *p*-напівпровідники. Окремо розглянуто біполярну провідність, закон Відемана – Франца, співвідношення Мотта. При цьому процеси розсіювання електронів враховано феноменологічно: середню довжину вільного пробігу апроксимовано степеневим законом. У Додатку наведено вирази для термоелектричних коефіцієнтів для 1D, 2D і 3D напівпровідників з параболічним законом дисперсії.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, термоелектричні коефіцієнти, інтеграли Фермі – Дірака