

УДК 537.32, 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

## ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ И УСТРОЙСТВА В КОНЦЕПЦИИ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА

Ю. А. Кругляк, проф.  
Л. С. Кострицкая, старш. преп.

Одесский государственный экологический университет,  
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, [quantumnet@yandex.ua](mailto:quantumnet@yandex.ua)

С позиций концепции «снизу – вверх» транспортной модели Ландауэра – Датты – Лундстрёма современной наноэлектроники рассматриваются термоэлектрические явления Зеебека и Пельтье и качественно обсуждаются закон Видемана – Франца, числа Лоренца и основные уравнения термоэлектричества с четырьмя транспортными коэффициентами (удельное сопротивление, коэффициенты Зеебека и Пельтье и электронная теплопроводность). С тех же позиций на примере 3D резистора в диффузионном режиме анализируется работа термоэлектрических охладителя и генератора энергии с учетом лишь электронов как реальных носителей тока, так и в рамках умозрительной, но удобной «дырочной» модели, вводятся и определяются понятия эффективности работы, КПД, фактора мощности и добротности термоэлектрических устройств и рассматривается каким образом транспортные коэффициенты зависят от свойств термик.

**Ключевые слова:** нанофизика, наноэлектроника, молекулярная электроника, термоэлектрические явления, термоэлектрические устройства.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Обобщенная транспортная модель Ландауэра – Датты – Лундстрёма (ЛДЛ) для задач наноэлектроники, впрочем, в равной мере пригодная также и для моделирования устройств микро- и макроэлектроники, изложена в [1, 2] для случая, когда температура контактов резистора одинакова. Теперь рассмотрим термоэлектрические (ТЭ) эффекты в модели ЛДЛ. Термоэлектрические устройства конвертируют тепло в электрический ток или же ток используется для нагревания/охлаждения [3 – 8].

При рассмотрении транспорта в массивных проводниках [1] для плотности тока вдоль длинной оси проводника  $x$  получено выражение через градиент электрохимического потенциала  $E_F$  с удельной проводимостью  $\sigma$  в роли коэффициента пропорциональности:

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} \cdot [\text{A}/\text{M}^2] \quad (1)$$

Перепишем это выражение через удельное сопротивление  $\rho$

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = \rho J_x, \quad (2)$$

а для однородных проводников

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = E_x, \quad (3)$$

где  $E_x$  – электрическое поле.

Далее будем рассматривать диффузионный транспорт в массивных 3D проводниках. Аналогичным образом можно рассматривать 1D и 2D проводники. Позже рассмотрим транспорт в баллистическом и квази-баллистическом режимах.

Как нужно изменить выписанные выше уравнения с учетом температурного градиента? Мы увидим ниже, что ответ на этот вопрос можно записать следующим образом:

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - S \sigma \frac{dT}{dx}, \quad (4)$$

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = \rho J_x + S \frac{dT}{dx}, \quad (5)$$

где  $S$  – коэффициент Зеебека в [В/К].

Термоэлектричество сочетает потоки электронов и тепла. Таким образом, в дополнение к уравнению для потока электронов нужно иметь уравнение для потока тепла. Поскольку тепло распространяется против градиента температуры, то для потока тепла можно ожидать пропор-

циональности вида

$$J_{Qx} = -\kappa \frac{dT}{dx} \quad [\text{Вт/м}^2] \quad (6)$$

Как изменится это уравнение в присутствии электрического тока? Ответ таков:

$$J_{Qx} = TS\sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - \kappa_0 \frac{dT}{dx}, \quad (7)$$

$$J_{Qx} = \pi J_x - \kappa \frac{dT}{dx}, \quad (8)$$

где коэффициент Пельтье

$$\pi = TS, \quad [\text{Вт/А}] \quad (9)$$

и

$$\kappa = \kappa_0 - S^2 \sigma T, \quad [\text{Вт/м} \cdot \text{К}] \quad (10)$$

есть электронная теплопроводность в условиях незамкнутой электрической цепи, а  $\kappa_0$  – в условиях короткозамкнутой цепи. И в том и в другом случае речь идет о переносе тепла только электронами.

Рассмотрим эффекты Зеебека и Пельтье подробнее.

## 2. ЭФФЕКТ ЗЕЕБЕКА

Если температура контактов проводника разная, возникает поток электронов от более нагретого контакта к менее нагретому (эффект Зеебека) и генерируется напряжение Зеебека  $V_{oc}$ , измерить которое можно прилагая к концам незамкнутой  $oc$  (open circuit) цепи напряжение противоположной полярности до прекращения тока (рис. 1).

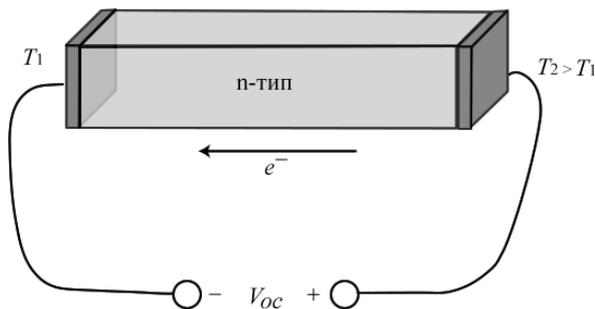


Рис. 1 – При разной температуре контактов электроны движутся в направлении от более нагретого контакта к менее нагретому.

Эффект Зеебека физически корректно рассматривать с учетом поведения фермиевских функций [1] при разных температурах (рис. 2).

Фермиевское окно проводимости составляет  $\sim \pm 2 kT$ , охватывающем значение  $E = E_F$  [1]. Чем

выше температура, тем доступнее окно проводимости. Ток зависит от разности фермиевских функций  $f_1 - f_2$  [1]. Если рассматривается проводник  $n$ -типа, то электронные состояния, обеспечивающие ток, находятся в зоне проводимости

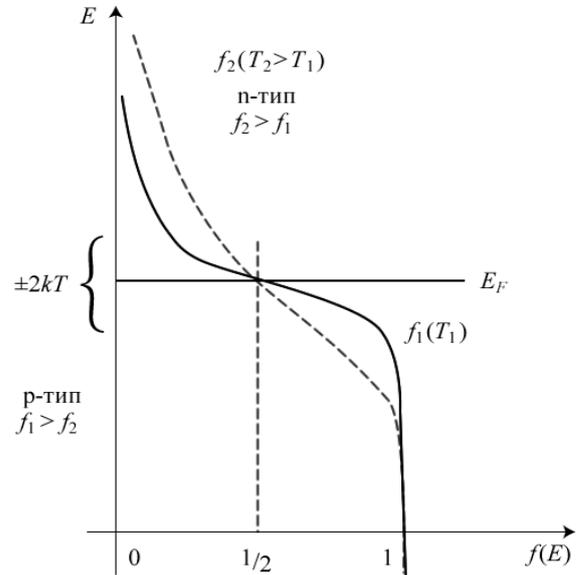
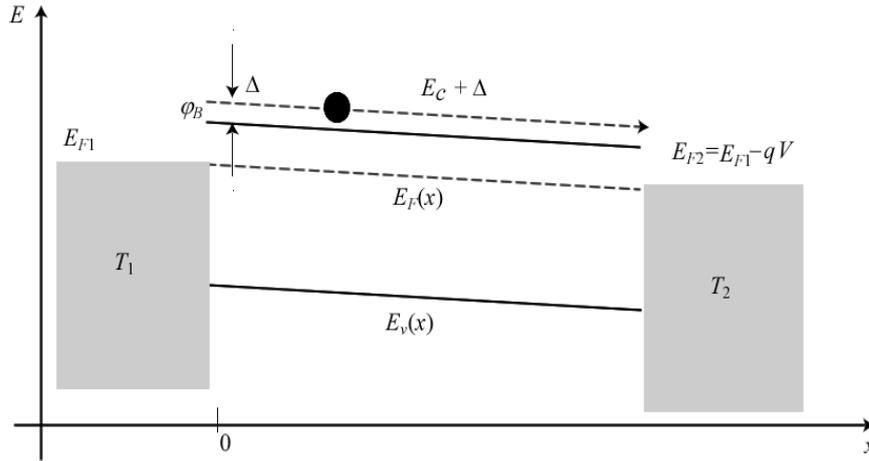


Рис. 2 – Качественный ход двух фермиевских функций с разными температурами.

выше уровня Ферми, где  $f_2 > f_1$ , а в проводнике  $p$ -типа ток обеспечивают «дырочные» состояния, лежащие ниже уровня Ферми в валентной зоне, где  $f_1 > f_2$  (рис. 2). В первом случае для прекращения тока ( $f_1 = f_2$ ) на контакт 2 нужно подать положительный потенциал, а во втором случае – отрицательный. В соответствии с этим напряжение Зеебека положительное для проводников  $n$ -типа и отрицательное для проводников  $p$ -типа. Этим пользуются для определения типа проводимости резистора.

Теперь рассмотрим, что же контролирует саму величину напряжения Зеебека. Рассмотрим  $n$ -проводник в состоянии равновесия, когда  $E_{F1} = E_{F2}$  и  $T_1 = T_2$ . Для любого состояния проводника вероятность  $f_1$  быть заселенным со стороны контакта 1 такая же как и вероятность  $f_2$  быть заселенным со стороны контакта 2:  $f_1 = f_2$ . Тока нет.

На рис. 3 показан проводник с подачей положительного потенциала на его контакт 2, что приводит к понижению электрохимического потенциала  $E_{F2} = E_{F1} - qV$ . Пусть вначале температура контактов одинакова ( $T_1 = T_2$ ). Теперь для любого состояния ( $E, x$ ) проводника  $f_1 > f_2$  и электроны потекут слева направо, что соответствует току в направлении отрицательной полуоси  $x$ . Рассмотрим ситуацию, когда и потенциал и температура контакта 2 больше чем для контак-



**Рис. 3** – Энергетическая диаграмма проводника *n*-типа при подаче разности потенциалов  $V_2 > V_1$ ; разность температур контактов может или иметь место или быть равной нулю.

та 1:  $V_2 > V_1$ ,  $T_2 > T_1$ . Тот факт, что  $T_2 > T_1$  вынуждает электроны перетекать с контакта 2 на контакт 1, а больший потенциал на контакте 2 по сравнению с контактом 1 вынуждает электроны двигаться в противоположном направлении. Другая тенденция уравнивает друг друга и ток равен нулю (рис. 3).

Пусть  $T_2 > T_1$ , а к контакту 2 приложен такой потенциал, что ток равен нулю (рис. 3).

Электроны движутся с энергией, лежащей чуть выше (на величину  $\Delta$ ) дна зоны проводимости. В некоторой промежуточной точке проводника (на бесконечно малом отрезке  $dx$ ) энергия есть  $E_c(0) + \Delta$ . Численное значение  $\Delta$  зависит от зонной структуры проводника и физики его рассеивающих центров, для невырожденных же проводников  $\Delta \approx 2kT$ . Ток через эту точку не идет, поскольку состояние в этой промежуточной точке характеризуется равенством  $f_1 = f_2$ . В условиях незамкнутой цепи

$$f_1 [E_c(0) + \Delta] = f_2 [E_c(0) + \Delta] \quad (11)$$

или в развернутом виде

$$\frac{1}{\exp\left[\frac{(E_c(0) + \Delta - E_{F1})}{kT}\right] + 1} = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E_c(0) + \Delta - E_{F1} - q\delta V)}{kT}\right] + 1}, \quad (12)$$

где учтено то обстоятельство, что на бесконечно малом отрезке  $dx$   $E_{F2} = E_{F1} - q\delta V$  (рис. 3). Из равенства показателей экспонент непосредственно следует, что

$$\delta V = -S\delta T \quad (13)$$

$$\text{с } \delta T = T_1 - T_2 \text{ и}$$

$$S = -\frac{E_c(0) + \Delta - E_{F1}}{qT_1} \equiv -\frac{E_{av} - E_{F1}}{qT_1}, \quad (14)$$

где  $E_c(0) + \Delta \equiv E_{av}$  есть среднее значение энергии, при которой движутся электроны. Коэффициент Зеебека пропорционален разности между этой средней энергией и фермиевской энергией на левом контакте  $E_{F1}$ . По договоренности, для *n*-проводников коэффициент Зеебека отрицательный. Перепишем ур-е (14) следующим образом

$$S(T) = -\frac{k}{q} \left( \frac{E_c - E_F}{kT} + \delta \right), \quad (15)$$

где  $\delta = \Delta / kT$ , а фундаментальная константа  $k/q = 86$  мкВ/К. Для невырожденных 3D проводников безразмерный параметр  $\delta \approx 2$ , а для сильно вырожденных

$$\delta \rightarrow \frac{E_F - E_C}{kT}, \quad (16)$$

что в пределе по мере удаления фермиевской энергии от дна зоны проводимости ведет к занулению коэффициента Зеебека (рис. 4).

Коэффициент Зеебека (с учетом знака) тем больше, чем глубже находится уровень Ферми относительно зоны проводимости (слабо легированные *n*-полупроводники).

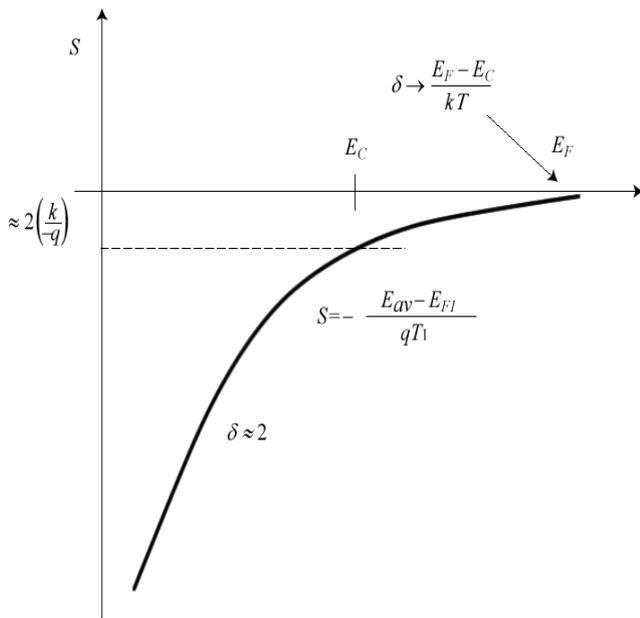


Рис. 4 – Поведение коэффициента Зеебека в зависимости от положения уровня Ферми  $E_F$  относительно дна зоны проводимости  $E_C$ .

При нахождении уровня Ферми на дне зоны проводимости коэффициент Зеебека  $\approx 2 \cdot 86$  мкВ/К. Чем выше поднимается уровень Ферми относительно дна зоны проводимости, тем меньше коэффициент Зеебека (низкие значения коэффициента Зеебека у металлов).

Подставим (15) в (13) и просуммируем по всей длине проводника, в результате чего получим перепад напряжения на концах проводника

$$\Delta V = - \int_{T_1}^{T_2} S(T) dT. \quad (J_x = 0). \quad (17)$$

Приведенные рассуждения показывают происхождение второго слагаемого в уравнении (5).

### 3. ЭФФЕКТ ПЕЛЬТЬЕ

Охлаждение и нагревание за счет эффекта Пельтье при прохождении тока по проводнику, поддерживаемому в изотермических условиях ( $T_1 = T_2$ ) иллюстрируется на рис. 5.

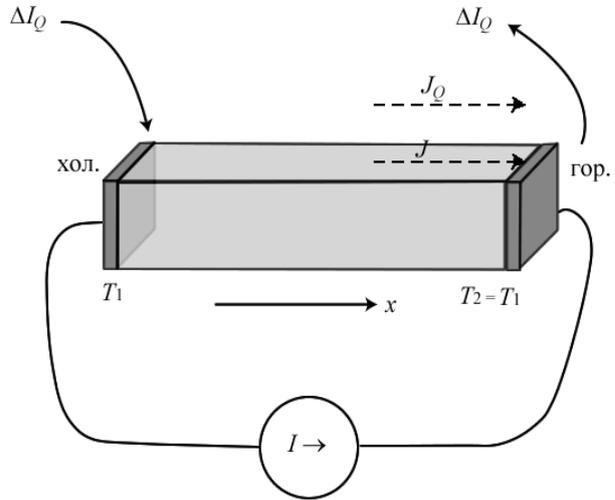


Рис. 5 – Прохождение тока по проводнику в изотермических условиях сопровождается охлаждением одного контакта и нагреванием другого (эффект Пельтье).

В соответствии с выбранным направлением тока электроны начинают движение с небольшой дрейфовой скоростью слева направо. По ходу движения электроны рассеиваются на фонах, приобретая при этом намного большую тепловую скорость. В результате поток электронов сопровождается потоком тепла (эффект Пельтье): правый контакт отдает тепло, а левый контакт поглощает тепло. Если направление тока изменить на противоположное, то миссии контактов поменяются местами.

Для оценки теплового потока обратимся к рис. 6.

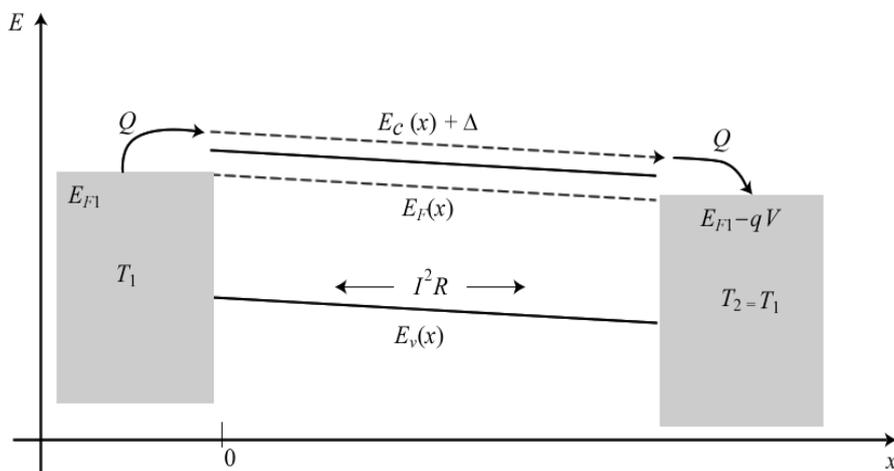


Рис. 6 – Энергетическая диаграмма слабо допированного полупроводника  $n$ -типа.

Металлические контакты сильно вырождены, так что фермиевское окно проводимости  $\partial f_0 / \partial E$  [1] представляет собой фактически  $\delta$ -функцию при  $E = E_F$ . В металлических контактах ток течет очень близко к фермиевской энергии. В слабо допированном полупроводнике ток течет чуть выше дна зоны проводимости при  $E_{av} = E_C(0) + \Delta$ . На границе металл/полупроводник энергия с фермиевского уровня возрастает до этого среднего значения  $E_{av}$  с поглощением тепла  $Q = E_C(0) + \Delta - E_{F1}$ . Эта тепловая энергия берется из решетки металлического контакта 1 (фононы). На противоположном контакте происходит обратное: тепло  $Q = E_C(L) + \Delta - E_{F2}$  диссипируется металлическим контактом 2, где  $L$  – длина проводника. Мы все это время рассматриваем массивный 3D проводник в диффузионном режиме. При прохождении тока по резистору выделяется также джоулево тепло  $I^2R$ , пропорциональное квадрату тока. Тепло Пельтье пропорционально первой степени тока. В случае сильно допированного полупроводника можно ожидать намного меньшего охлаждения/нагрева контактов за счет эффекта Пельтье, поскольку средняя энергия  $E_{av}$  за счет меньшего потенциала барьера  $\phi_B$  (рис. 3) лежит намного ближе к фермиевской энергии по сравнению со слабо допированным полупроводником.

Рассмотрим подробнее область вблизи левого контакта 1 (рис. 7).

Электроны с энергией большей, чем высота барьера  $\phi_B$  (рис. 3) термически эмитируются из металла в полупроводник. Металл покидают высокоэнергетические электроны (рис. 7: серый овал), нарушая при этом равновесное фермиевское распределение.

Процесс перехода сопровождается электрон-фононным рассеянием с поглощением тепла проводником и охлаждением контакта. Энергия поглощается из решетки металлического контакта, поднимая энергию низкоэнергетических электронов выше и восстанавливая равновесное фермиевское распределение. Этот процесс напоминает испарение жидкости, в котором роль жидкости играют электроны в металле.

Вычислим поток тепла, сопровождающий поток электронов. Поток электронов в направлении положительной полуоси  $x$  есть  $J_x/(-q) > 0$ , поскольку  $J_x < 0$ . Каждый электрон, переходящий из контакта 1 в проводник, переносит тепловую энергию в количестве  $Q = E_C(0) + \Delta - E_{F1}$ .

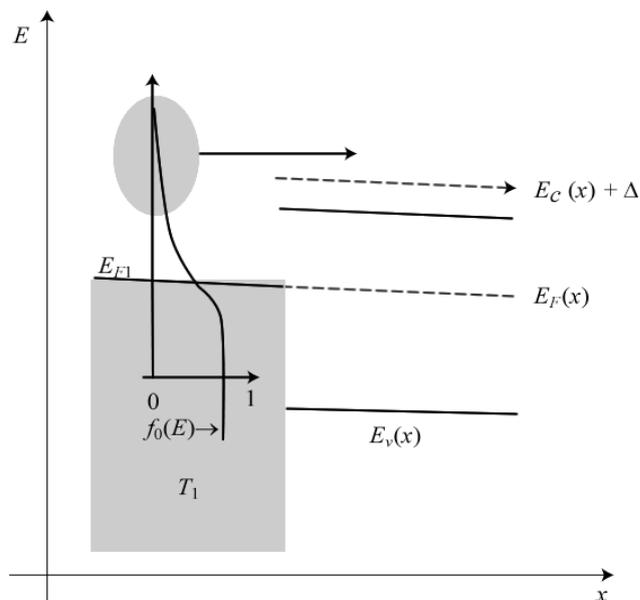


Рис. 7 – К механизму поглощения тепла на левом контакте 1.

Таким образом, поток тепла будет

$$J_{Q1} = [E_C(0) + \Delta - E_{F1}] \times J_x/(-q) = \pi J_x, \quad (18)$$

где коэффициент Пельтье

$$\pi = - [E_C(0) + \Delta - E_{F1}] / q. \quad (19)$$

Коэффициент Пельтье отрицательный для  $n$ -проводников. Сравнивая (19) и (14), получаем

$$\pi = T_1 S. \quad (20)$$

Аналогичное выражение получается для контакта 2 с заменой  $T_1$  на  $T_2$ . Эта связь двух тепловых коэффициентов – Зеебека и Пельтье (9) известна как соотношение Кельвина.

Мы получили первое слагаемое в уравнении (8). Во втором слагаемом фигурирует электронная теплопроводность в условиях незамкнутой электрической цепи  $\kappa$ . Выражение для нее получим позже. Сейчас же уместно предположить, что электронная теплопроводность  $\kappa$  и удельная электронная проводимость  $\sigma$  связаны между собой, поскольку поток электронов сопровождается потоком тепла. Мы позже получим следующее соотношение между ними

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT, \quad (21)$$

где  $L$  называют числом Лоренца, а соотношение (21) – законом Видемана – Франца [9]. Они не столь фундаментальны как соотношение

Кельвина (9), поскольку зависят от особенностей зонной структуры и характера рассеяния в конкретном проводнике [10]. Для типичного полупроводника с параболической дисперсией и с постоянным средним значением длины свободного пробега

$$L \approx 2 \times \left( \frac{k}{q} \right)^2, \text{ (невыврожденный проводник), (22)}$$

$$L \approx \frac{\pi^2}{3} \times \left( \frac{k}{q} \right)^2 \text{ (вырожденный проводник). (22')}$$

Термин «закон Видемана – Франца» обычно подразумевает формулу (21) с числами Лоренца (22). У проводников меньшей размерности числа Лоренца совсем не похожи на (22). Общее выражение для  $L$  получим позже.

Итак, основными уравнениями ТЭ служат уравнения (5), (8) и (9) с четырьмя транспортными коэффициентами: 1) удельное сопротивление  $\rho = 1/\sigma$ ; 2) коэффициент Зеебека  $S$ ; 3) коэффициент Пельтье  $\pi$ ; 4) электронная теплопроводность  $\kappa$ .

Электрическая проводимость  $\sigma$  подробно обсуждалась ранее [2]. Для 3D массивного проводника в диффузионном режиме для удельной и дифференциальной проводимости  $\sigma'$  имеем:

$$\sigma = \int \sigma'(E) dE = \frac{2q^2}{h} \langle M_{3D} \rangle \langle \langle \lambda \rangle \rangle, \quad (23)$$

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}(E) \times \lambda(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), [1/\text{Ом}\cdot\text{м}\cdot\text{Дж}], \quad (24)$$

где  $M_{3D}(E)$  – число мод проводимости при энергии  $E$  на единицу площади поперечного сечения проводника.

Коэффициент Зеебека дается уравнением (15) с безразмерным параметром

$$\delta = (E_{av} - E_C) / kT, \quad (25)$$

определяющим среднюю энергию, с которой электрон движется по проводнику, относительно дна зоны проводимости. Поскольку дифференциальная проводимость определяет распределение тока по энергии, то

$$\delta = \frac{1}{kT} \left( \frac{\int (E - E_C) \sigma'(E) dE}{\int \sigma'(E) dE} \right) \quad (26)$$

Мы также знаем, что коэффициент Пельтье связан с коэффициентом Зеебека соотношением Кельвина

$$\pi(T) = TS(T). \quad (27)$$

Уравнения (5) и (8) являются частным случаем более общих уравнений связанных потоков [11]. В нашем случае температурный градиент порождает электрический ток, а он в свою очередь порождает поток тепла. Перекрестные коэффициенты  $S$  и  $\pi$  фундаментально связаны друг с другом соотношением Кельвина, которое является частным случаем более общих соотношений Онзагера [12].

Мы также имеем уравнение для электронной теплопроводности

$$\kappa = L\sigma T, \quad (28)$$

которое учитывает перенос тепла только электронами. В металлах большую часть тепла переносят электроны, а в полупроводниках – фононы, к рассмотрению которых в транспортной модели ЛДЛ мы вернемся в другой публикации.

#### 4. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ УСТРОЙСТВА

Пионерские теоретические и прикладные исследования А. Ф. Иоффе в 50 – 60 годы в Ленинграде [3] сыграли решающую роль в развитии физики ТЭ явлений.

Последние 30 лет характеризуются неуклонным прогрессом в области физики ТЭ генераторов тока для дальних космических аппаратов. В последние годы надежды на улучшение показателей эффективности работы ТЭ устройств и показателей качества термиков возлагают на наноструктурированные материалы [14 - 16]. Так это или не так покажут только экспериментальные исследования.

Принципиальная схема ТЭ охладителя показана на рис. 8. Так это или не так покажут только экспериментальные исследования.

Ток подается на  $n$ - и  $p$ -ветви, которые соединены последовательно металлической перемычкой. Электроны и дырки движутся сверху вниз, унося с собой тепло из перемычки через переходы металл/полупроводник.

Каким образом следует обсуждать работу ТЭ устройства в терминах только электронных потоков, а не потоков электронов и «дырок», как это проводилось до сих пор. «Дырки» являются, в лучшем случае, концептуальным понятием, а измеряемые на практике эффекты вызваны движением электронов и не могут зависеть от субъ-

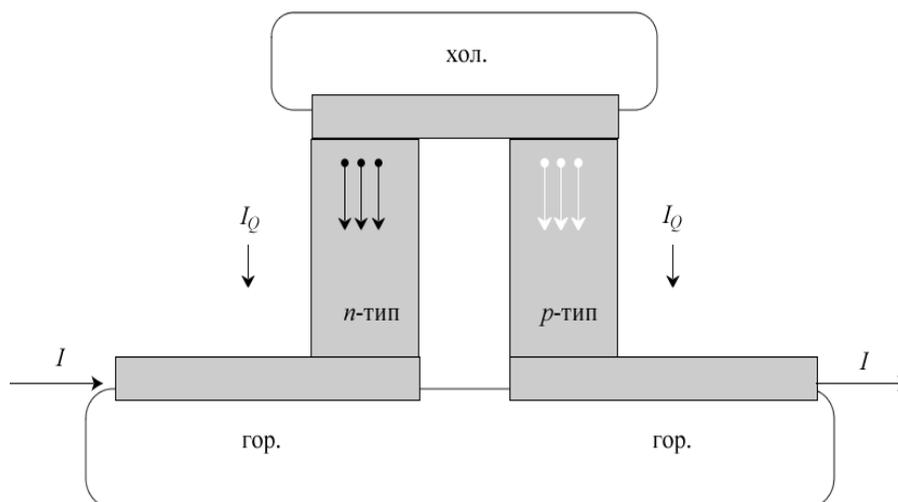


Рис. 8. – Схема ТЭ охладителя.

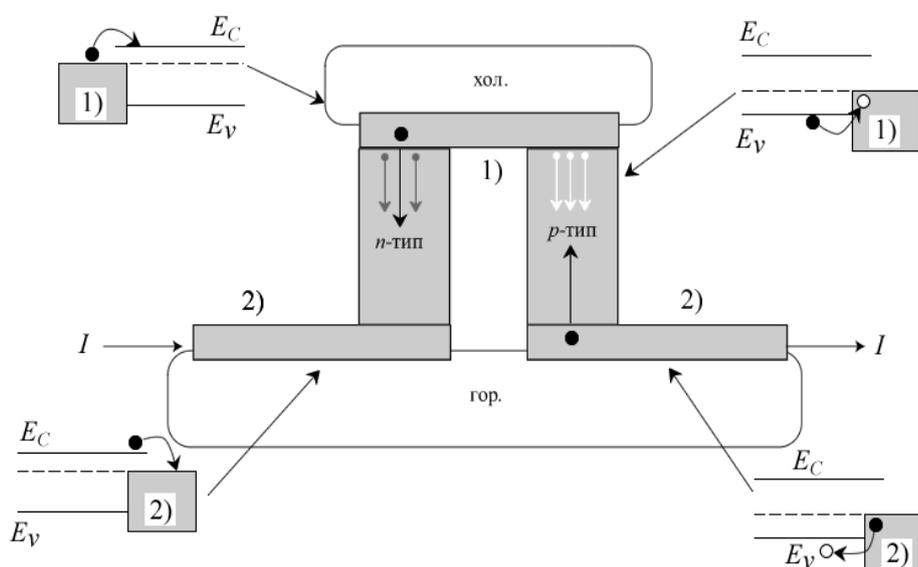


Рис. 9 – Движение электронов в ТЭ охладителе (рис. 8) в n- и p-ветвях показано темными стрелками.

активных, хотя и очень удобных, договоренностей. Не говоря уже о том, что вся развитая в [1, 2] транспортная модель ЛДЛ выписана для электронов, хотя и было показано, как трансформировать ее для «дырок».

Электронные потоки в ТЭ охладителе показаны на рис. 9.

По левой *n*-ветви электроны движутся сверху от охлаждаемой металлической перемычки вниз к нагреваемому контакту, через который ток подается в охладитель. В правой *p*-ветви электроны движутся снизу от правого контакта вверх к охлаждаемой металлической перемычке. Диаграммы зонной структуры иллюстрируют как именно нужно понимать эффект охлаждения по Пельтье через движение электронов. Например,

наверху слева электрон, покидая металлическую перемычку чтобы перейти в зону проводимости *n*-полу-проводника, поглощает тепло из перемычки. Наверху справа электрон движется вверх по валентной зоне *p*-полупроводника, поглощая при этом энергию, с тем, чтобы заполнить собой пустое состояние вблизи поверхности металлической перемычки. Внизу слева тепло, забранное электроном из металлической перемычки, выделяется в левый контакт при переходе в него электрона из зоны проводимости *n*-полупроводника.

Внизу справа электрон при переходе из металлического контакта в *p*-полупроводник также выделяет тепло, понижая свою энергию, чтобы заполнить пустое состояние в валентной зоне

*p*-полупроводника. Эти переходы на границе *n*- и *p*-полупроводников с металлом можно обсуждать через потоки электронов, либо через потоки электронов и дырок, как это кому удобно. Для конкретного устройства охлаждения надлежит ответить на следующие очевидные вопросы: 1) Какая максимальная разница температур может быть достигнута? 2) Какое количество тепла можно забрать? 3) Что является показателем эффективности охладителя Пельтье? На рис. 10 показана схема ТЭ преобразователя энергии. Принципиальное отличие от охладителя Пельтье (рис. 8) состоит лишь в том, что теперь тепло подается извне, а подложка охлаждается, в результате чего во внешней цепи (на рисунке с нагрузкой) возникает ток Зеебека.

Направление движения носителей тока точно такое же, как и в охладителе Пельтье. Основной вопрос: что определяет эффективность конвертации тепла в электрический ток?

В обоих устройствах *n*- и *p*-ветви электрически соединены последовательно, а термически – параллельно. В реальных устройствах создается много таких термопар.

Последовательное соединение ветвей увеличивает напряжение, что позволяет передать больший ток, а их термическая параллельность позволяет увеличить количество переносимого тепла.

Как оценить добротность ТЭ устройства покажем на примере охладителя Пельтье с одной *n*-ветвью (рис. 11).

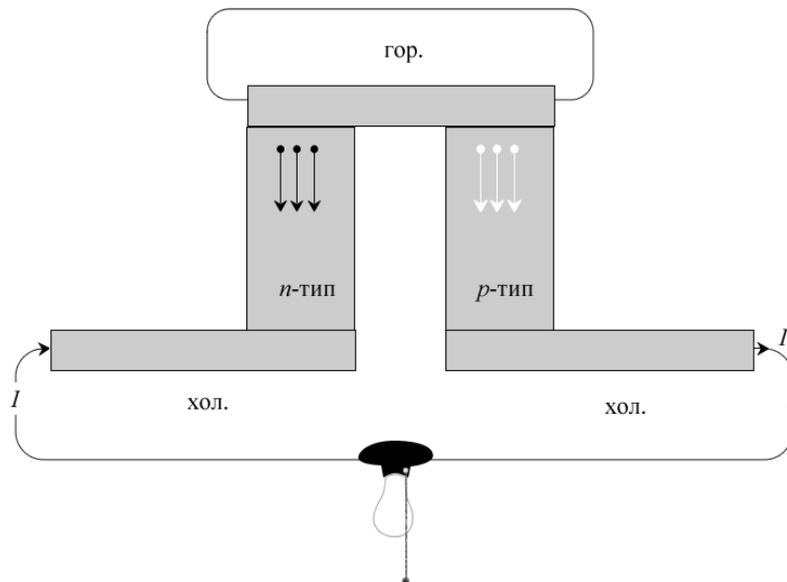


Рис. 10 – Схема ТЭ преобразователя энергии.

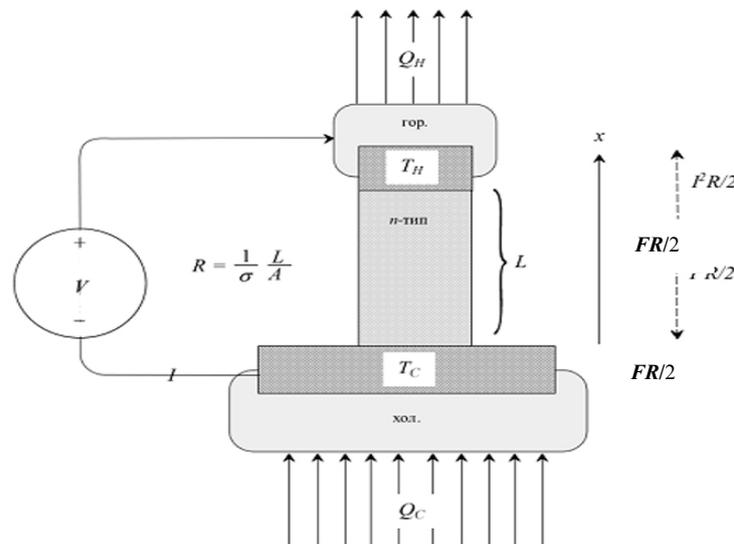


Рис. 11 – Охладитель Пельтье с одной *n*-ветвью.

Опираясь на ур-е (8) для удельного потока тепла, баланс тепловых потоков такого охладителя Пельтье имеет вид

$$Q_C = \pi \frac{I}{A} - \kappa \frac{\Delta T}{L} - \frac{I^2 R}{2A}, \quad [Вт/м^2], \quad (29)$$

где учтена половина джоулева тепла, противодействующая передаче тепла снизу вверх, а  $\Delta T = T_H - T_C$ .

Максимальное количество передаваемого тепла  $Q_C^{\max}$  находится из условия  $dQ_C/dI = 0$ , учитывая которое сначала находим  $I^{\max}$ , а после подстановки его в (29) находим  $Q_C^{\max}$ . Для определения максимально достижимой разности температур  $\Delta T^{\max}$ , положим  $Q_C^{\max} = 0$  и найдем, что

$$\Delta T^{\max} = \frac{1}{2} Z T_C^2, \quad (30)$$

где

$$Z = \frac{S^2 \sigma}{\kappa} [K^{-1}] \quad (31)$$

есть добротность ТЭ устройства (thermoelectric figure of merit) – важнейший показатель эффективности работы ТЭ устройства. Максимальная разность температур достигается при токе  $I^{\max}$  и  $Q_C^{\max} = 0$ .

Следующий вопрос заключается в определении эффективности охлаждения, определяемой коэффициентом полезного действия (кпд) устройства (coefficient of performance) как отношение закачанного тепла к затраченной электрической мощности

$$\eta = \frac{Q_C}{P_{in}}. \quad (32)$$

Кпд можно посчитать двумя способами. Из условия  $d\eta/dI = 0$  сначала определяем ток, соответствующий максимальному кпд, а затем это значение тока подставляем в (32) и получаем максимально возможный кпд. По другому, можно воспользоваться значением  $I^{\max}$ , обеспечивающему максимально возможную передачу тепла, и подставить его в (32) и таким образом найти кпд, соответствующий максимальному возможному охлаждению [17 – 19]

$$\eta = \frac{Q_C}{P_{in}} = f_P(T_H, T_C, Z). \quad (33)$$

Кпд охладителя Пельтье дается функцией, зависящей от температуры холодной и горячей пластин и добротности ТЭ устройства. Кпд определяется разностью температур и комбинацией термоэлектрических коэффициентов в том виде, как они входят в выражение для добротности (31): большая проводимость понижает потери джоулева тепла, больший коэффициент Зеебека увеличивает количество отобранного тепла, меньшая теплопроводность уменьшает возврат тепла от горячей пластины к охлаждаемой.

Аналогичные рассуждения можно провести для ТЭ преобразователя энергии (рис. 9). Опять, записывается тепловой баланс для горячей пластины: поток тепла, который мы хотим превратить в электрический ток, равен передаваемому теплу Пельтье плюс тепло, диффундирующее от горячей пластины к холодной, минус половина противодействующего джоулева тепла. Кпд ТЭ генератора энергии будет просто отношение полученной мощности к затраченной

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{I^2 R_L}{A Q_{in}}, \quad (34)$$

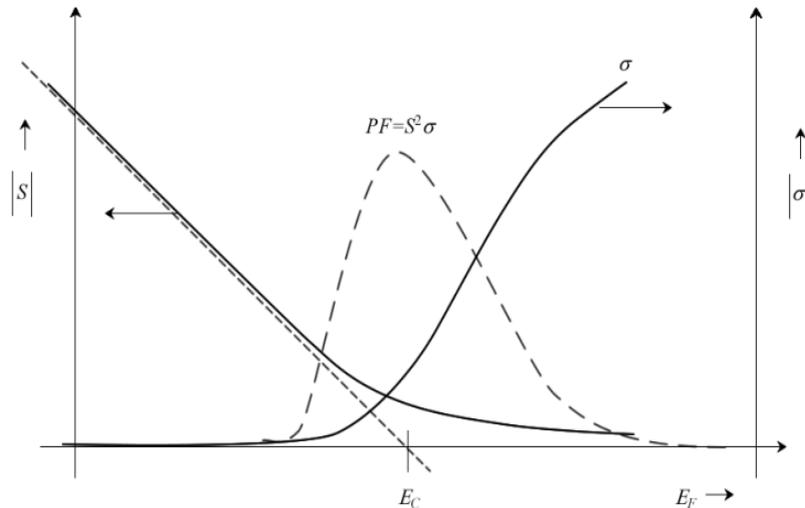
где  $R_L$  – сопротивление нагрузки. Ток определяется перепадом температур пластин. Максимально возможное значение кпд сводится к решению уравнения  $d\eta/dR_L = 0$ , которое дает оптимальное значение сопротивления нагрузки, после подстановки которого в (34) получаем искомый кпд. Как и в случае с охладителем Пельтье, кпд генератора энергии определяется добротностью ТЭ устройства  $Z$ .

И в случае охладителя и в случае генератора энергии кпд определяется добротностью ТЭ устройства, которая существенно определяется свойствами термиков. На практике контакты и интерфейсные соединения, как электрические, так и термические, так или иначе понижают кпд ТЭ устройства, и решающую роль играют свойства используемых термиков.

Осталось обсудить еще роль добротности ТЭ устройства в обеспечении эффективности его работы. Добротность обычно записывают в безразмерном виде

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa + \kappa_L}, \quad (35)$$

где  $\kappa_L$  – теплопроводность решетки проводника.



**Рис. 12.** Качественная зависимость коэффициента Зеебека (слева) и электронной проводимости (справа) от положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости. Показана также максимизация фактора мощности  $PF$  вблизи дна зоны проводимости [20].

По мере того как уровень Ферми приближается к дну зоны проводимости снизу, а затем движется вверх по зоне проводимости, коэффициент Зеебека уменьшается. В то же время электронная проводимость растет за счет появления все большего числа мод проводимости. Их произведение называют фактором мощности  $PF$  (Power Factor), который максимален в районе дна зоны проводимости. Положение максимума для конкретного термиста зависит от особенностей зонной структуры проводника и физики его рассеивающих центров. На практике стараются путем допирования полупроводника сместить уровень Ферми поближе к дну зоны проводимости.

## 5. ВЫВОДЫ

На примере 3D резистора в диффузионном режиме мы обсудили физику эффектов Зеебека и Пельтье, качественно показали происхождение основных уравнений ТЭ, рассмотрели каким образом четыре ТЭ параметра зависят от свойств термистов и как работают ТЭ охладитель и генератор, ввели понятия добротности и КПД ТЭ устройств.

Для количественного описания ТЭ эффектов в резисторах любой размерности и любого масштаба, работающих в баллистическом, диффузионном или квазibalлистическом режиме, требуется строгий вывод соответствующих транспортных уравнений, чему будет посвящено следующее сообщение.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны Н.Е. Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРА

1. Kruglyak Yu. S. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 2013, vol. 11, no. 3, pp. 519 – 549. (In Russian)
2. Kruglyak Yu. S. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 2013 vol. 11, pp. 655 – 677. (In Russian)
3. Ioffe A. F. *Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling*. London: Infosearch, 1957.
4. Анатычук Л. И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства. Киев: Наукова думка, 1979.
5. Анатычук Л. И., Семенюк В. А. Оптимальное управление свойствами термоэлектрических материалов и приборов. Черновцы: Прут, 1992.
6. Анатычук Л. И., Булат Л. П. Полупроводники в экстремальных температурных условиях. Ленинград: Наука, 2003.
7. Анатычук Л. И. Термоэлектричество. Т. 2. Термоэлектрические преобразователи энергии. Киев – Черновцы: Институт термоэлектричества, Букрек, 2003.
8. Анатычук Л. И. Термоэлектричество. Т. 1. Физика термоэлектричества. Киев – Черновцы: Институт термоэлектричества, Букрек, 2009.
9. Ашкрофт Н., Мермин. Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979
10. Mahan G. D, Bartkowiak M. *Appl. Phys. Lett*, 1999, vol. 74, no 7, pp. 953 – 954.
11. Smith C., Janak J., Adler R. *Electronic Conduction in Solids*. New York: McGraw-Hill, 1965.
12. Onsager L. *Phys. Rev.*, 1931, vol. 37, no. 4, pp. 405 – 426.
13. Институт термоэлектричества НАНУ/МОН Украины: <http://www2.inst.cv.ua>
14. Majumdar A. *Science*, 2004, no. 303, pp. 778 – 779.
15. M. Dresselhaus, G. Chen, M. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleureal, P. Gogna. *Adv. Materials*, 2007, vol. 19, no. 8, pp. 1043 – 1053.

16. Minnich A. J., Dresselhaus M. S., Ren Z. F., G. Chen. *Energy and Environmental Science*, 2009, pp. 466 – 479.
17. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2005, vol. 28, pp. 218 – 229.
18. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2007, vol. 30, pp. 50 – 58.
19. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2010, vol. 33, pp. 307 – 318.
20. Lundstrom M., Jeong. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. <http://www.nanohub.org/resources/11763>. (In Russian).

## REFERENCES

1. Kruglyak Yu. S. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 2013, vol. 11, no. 3, pp. 519 – 549. (In Russian)
2. Kruglyak Yu. S. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 2013 vol. 11, pp. 655 – 677. (In Russian)
3. Ioffe A. F. *Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling*. London: Infosearch, 1957.
4. Anatyshchuk L. I. *Termoelementy i termoelektricheskie ustroystva* [Thermoelements and thermoelectric devices]. Kiev: Naukova dumka, 1979.
5. Anatyshchuk L. I., Semenyuk V. A. *Optimal'noe upravlenie svoystvami termoelektricheskikh materialov i priborov*. [Optimum control of the properties of thermoelectric materials and devices]. Chernovtsy: Prut, 1992.
6. Anatyshchuk L. I., Bulat L. P. *Poluprovodniki v ekstremal'nykh temperaturnykh usloviyakh* [Semiconductors under extreme temperature conditions]. Leningrad: Nauka, 2003.
7. Anatyshchuk L. I. *Termoelektrichestvo. T. 2. Termoelektricheskie preobrazovateli energii* [Thermoelectricity. T. 2. Thermoelectric power converters]. Kiev – Chernovtsy: The Institute of Thermoelectricity, Bukrek, 2003.
8. Anatyshchuk L. I., *Termoelektrichestvo. T. 1. Fizika termoelektrichestva*. [Thermoelectricity. T. 1. Physics of thermoelectricity]. Kiev – Chernovtsy: The Institute of Thermoelectricity, Bukrek, 2009.
9. Ashcroft N., Mermin N. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics]. Moscow: Mir, 1979.
10. Mahan G. D., Bartkowiak M. *Appl. Phys. Lett*, 1999, vol. 74, no 7, pp. 953 – 954.
11. Smith C., Janak J., Adler R. *Electronic Conduction in Solids*. New York: McGraw-Hill, 1965.
12. Onsager L. *Phys. Rev.*, 1931, vol. 37, no. 4, pp. 405 – 426.
13. The Institute of Thermoelectricity of NASU / MES of Ukraine: <http://www2.inst.cv.ua> (In Russian)
14. Majumdar A. *Science*, 2004, no. 303, pp. 778 – 779.
15. M. Dresselhaus, G. Chen, M. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleureal, P. Gogna. *Adv. Materials*, 2007, vol. 19, no. 8, pp. 1043 – 1053.
16. Minnich A. J., Dresselhaus M. S., Ren Z. F., G. Chen. *Energy and Environmental Science*, 2009, pp. 466 – 479.
17. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2005, vol. 28, pp. 218 – 229.
18. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2007, vol. 30, pp. 50 – 58.
19. Hode M. *IEEE Trans. Components Packaging Technologies*, 2010, vol. 33, pp. 307 – 318.
20. Lundstrom M., Jeong. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. <http://www.nanohub.org/resources/11763>. (In Russian).

## THERMOELECTRIC PHENOMENA AND DEVICES IN THE GENERALIZED MODEL OF ELECTRON TRANSPORT

**Yu. A. Kruglyak**, Prof.,  
**L. S. Kostritskaya**, Sen. Lect.

*Odessa State Environmental University,  
Lvivska str., 15, 65016, Odessa, Ukraine, [quantumnet@yandex.ua](mailto:quantumnet@yandex.ua)*

In the tutorial review article intended for researchers, university lecturers and students the thermoelectric Seebeck and Peltier phenomena are considered in the framework of a generalized transport model due to R. Landauer, S. Datta, and M. Lundstrom of modern nanoelectronics within the "bottom – up" approach. The Wiedemann – Franz law and Lorenz numbers as well as the four transport coefficients (specific resistivity, Seebeck and Peltier coefficients, and electronic thermal conductivity) are also qualitatively discussed. Referring to a 3D resistor in the diffusion regime the thermoelectric cooler and energy power generator are analyzed with an account of only electrons as real current carriers as well as with artificial but useful electron/hole conception. Coefficient of performance, power factor and figure of merit for thermoelectric devices are introduced and defined. How transport coefficients depend on the properties of electrotermics are also discussed. Qualitative dependence of the Seebeck coefficient and electronic conductivity from the position of the Fermi level relative to the bottom of the conduction band is demonstrated. Maximization of the power factor near the bottom of the conduction band is shown. As the Fermi level approaches to the bottom of the conduction band and then moves up, the Seebeck coefficient decreases. At the same time, the electronic conductivity increases due to the appearance of an increasing number of

conductivity modes. Their product is the power factor, which is maximal in the vicinity of the bottom of the conduction band. The position of the maximum for a specific electrothermics is dependent on the band structure of the conductor and the physics of its scattering centers. It is shown why in practice we try by doping the semiconductor to shift the Fermi level closer to the bottom of the conduction band.

**Keywords:** nanophysics, nanoelectronics, thermoelectric phenomena, thermoelectric devices.

## ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ЯВИЩА І ПРИСТРОЇ В КОНЦЕПЦІЇ УЗАГАЛЬНЕНОЇ МОДЕЛІ ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ

**Ю. О. Кругляк**, проф.,  
**Л. С. Кострицька**, ст. викл.

*Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська,  
15, 65016 Одеса, Україна, [quantumnet@yandex.ua](mailto:quantumnet@yandex.ua)*

З позицій концепції «знизу – вгору» транспортної моделі Ландауера – Датти – Лундстрорма сучасної наноелектроніки розглядаються термоелектричні явища Зеебека і Пельтьє і якісно обговорюються закон Відемана – Франца, числа Лоренца і основні рівняння термоелектрики з чотирма транспортними коефіцієнтами (питомий опір, коефіцієнти Зеебека і Пельтьє та електронна теплопровідність). З тих же позицій на прикладі 3D резистора в дифузійному режимі аналізується робота термоелектричних охолоджувача і генератора енергії з урахуванням лише електронів як реальних носіїв струму, так і в рамках уможливленої, але зручної «діркової» моделі, вводяться і визначаються поняття ефективності роботи, ккд, фактора потужності і добротності термоелектричних пристроїв і розглядається яким чином транспортні коефіцієнти залежать від властивостей терміків.

**Ключові слова:** нанофізика, наноелектроніка, термоелектричні явища, термоелектричні пристрої.

*Дата першого подання: 06. 04. 2017*

*Дата надходження остаточної версії: 26. 09. 2017*

*Дата публікації статті: 30. 11. 2017*