## УДК 538.9



Горський П.В.

## Горський П.В.

Інститут термоелектрики НАН і МОН України, вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна

# ПРО УМОВИ ВИСОКОЇ ДОБРОТНОСТІ Й МЕТОДИКИ ПОШУКУ ПЕРСПЕКТИВНИХ НАДГРАТКОВИХ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ

У роботі проведено строгі розрахунки добротності надграткового термоелектричного матеріалу (НГТЕМ) з урахуванням реальної тривимірності й непараболічності його енергетичного спектру за довільного ступеня відкритості його поверхні Фермі (ПФ). Кількісною характеристикою ступеня відкритості ПФ при цьому слугує відношення енергії Фермі ідеального двовимірного Фермі-газу із квадратичним законом дисперсії за абсолютного нуля температури до півширини вузької міні-зони, що визначає рух носіїв заряду між шарами НГТЕМ. При цьому закон дисперсії носіїв заряду у вузькій мінізоні передбачається таким, що відповідає моделі Фіваза, тобто косинусоїдальним. При розрахунках добротності також вважається, що довжина вільного пробігу носіїв заряду обернено пропорційна температурі й не залежить від їх енергії, і, отже, квантових чисел, а граткова складова теплопровідності підкоряється закону Лейбфріда-Шлемана, тобто також обернено пропорційна температурі. Показано, що добротність НГТЕМ і відповідний ККД генератора в діапазоні температур 300–500 К різко зростають зі зростанням ступеня відкритості ПФ. Однак у силу наявності граткової складової теплопровідності добротність НГТЕМ досить чутлива до відстані між шарами й різко падає з її збільшенням. Ті ж тенденції характерні для відповідних залежностей холодильного коефіцієнта в діапазоні температур 300–230 К. На основі цих залежностей встановлено оптимальні параметри високодобротного НГТЕМ. Виходячи з отриманих критеріїв, пропонуються чотири методики пошуку перспективних НГТЕМ з використанням квантуючих магнітних полів/

Ключові слова: надгратка, непараболічність, модель Фіваза, поверхня Фермі, ступінь відкритості, термоелектрична добротність, ККД, холодильний коефіцієнт, осцилляції Шубнікова – де Гааза, негативний поздовжній магнітоопір.

This paper presents a rigorous calculation of the figure of merit of superlattice thermoelectric material (SL TEM) with regard to real three-dimensionality and nonparabolicity of its energy spectrum with the arbitrary level of openness of its Fermi surface (FS). In this case, the quantitative characteristic of the level of openness of FS is the ratio of the Fermi energy of ideal two-dimensional Fermi gas with a square law of dispersion at absolute zero temperature to half-width of a narrow miniband defining charge carrier motion between SL TEM layers. In so doing, the law of dispersion of charge carriers in a narrow miniband is assumed to be corresponding to the Fivaz model, i.e. cosine. In the calculation of the figure of merit it is also assumed that the mean free path of charge carriers is inversely proportional to temperature and does not depend on their energy, hence on quantum numbers, and the lattice component of thermal conductivity obeys the law of Leibfried and Shlemann, i.e. it is also

inversely proportional to temperature. It is shown that the figure of merit of SL TEM and the respective generator efficiency in the temperature range of 300-500K is drastically increased with increasing level of openness of FS. However, due to the presence of lattice component of thermal conductivity, the figure of merit of SL TEM is rather responsive to the distance between the layers and drastically drops with its increase. The same tendencies are characteristic of the respective dependences of coefficient of performance in the temperature range of 300-230K. From these dependences the optimal parameters of high-figure-of-merit SL TEM are determined. Using the obtained criteria as the base, four methods of search for promising SL TEM with the use of quantizing magnetic fields are proposed.

**Key words**: superlattice, nonparabolicity, Fivaz model, Fermi surface, level of openness, thermoelectric figure of merit, efficiency, coefficient of performance, de Haas-Shubnikov oscillations, negative longitudinal magnetoresistance.

#### Вступ

Термоелектрична добротність матеріалу є одним із ключових параметрів, що визначають доцільність його застосування для створення термоелектричних перетворювачів енергії. Підвищення добротності термоелектричних матеріалів здійснюється в основному двома шляхами. Перший полягає в удосконаленні традиційних матеріалів, наприклад, твердих розчинів системи Bi(Sb)-Te(Se) за рахунок оптимізації їх за концентрацією легуючих домішок [1] або за рахунок використання класичних і (або) квантових розмірних ефектів переходом від монокристалів до тонких плівок, ниток, або матеріалів на основі порошків [2-5]. Другий шлях полягає у пошуку (створенні) «нетрадиційних» матеріалів, особливості зонного спектра носіїв заряду в яких дають підстави сподіватися на високі значення термоелектричної добротності. Як такі матеріали досить широко досліджуються так звані «надграткові» матеріали з яскраво вираженою шаруватою структурою й анізотропією зонного спектра носіїв заряду [6-8], приміром, матеріали на основі системи Al-Ga-As або системи Si-Ge, широко застосовувані в електроніці й оптиці [9]. Надії на високу термоелектричну добротність таких матеріалів пов'язані з тим, що носії заряду в цих матеріалах сильно локалізовані в шарах, у силу чого зонний спектр носіїв заряду має «майже» двовимірний характер. А це, принаймні, у силу різкого зростання густини станів, і, отже, термоЕРС, повинно б призводити до істотного підвищення термоелектричної добротності НГТЕМ. Однак численні експериментальні дані [10-15] свідчать, що в реальності термоелектрична добротність цих матеріалів не перевищує добротності традиційних матеріалів або навіть суттєво нижче від. Відносно високі значення ZT порядку 2-4 за 300 К у відомих або досліджуваних НГТЕМ трапляються рідко.

У силу сказаного вище мета статті – обгрунтована оцінка термоелектричної добротності НГТЕМ, аналіз факторів, що підвищують або знижують її, і вироблення методики пошуку перспективних НГТЕМ з використанням квантуючих магнітних полів.

#### Загальна формула для добротності НГТЕМ та її аналіз

У рамках моделі Фіваза [16] зонний спектр носіїв заряду в НГТЕМ має такий вигляд:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + \Delta(1 - \cos ak_{\perp}), \qquad (1)$$

де  $k_{\parallel}, k_{\perp}$  – компоненти квазіімпульсу в площині шарів і в перпендикулярному до них напрямку відповідно,  $m^*$  – ефективна маса носіїв заряду в напрямку, перпендикулярному шарам,  $\Delta$  – півширина мінізони в напрямку перпендикулярному шарам, a – відстань між трансляційно еквівалентними шарами. Під час розрахунків будемо вважати градієнт температури й електричне поле паралельними один одному та площинам шарів. При цій конфігурації в наближенні незалежності довжини вільного пробігу носіїв заряду від енергії безрозмірна термоелектрична ефективність НГТЕМ в області домішкової провідності за температури *T* з урахуванням внеску граткової теплопровідності визначається в такий спосіб:

$$ZT = 8\pi^{3} \frac{A_{0}}{B_{0} + c_{l} \left(2k_{B}\zeta_{02D}^{2}l\right)^{-1} ah^{2} \sqrt{m^{*-1}\zeta_{02D}}}.$$
(2)

Безрозмірні функції  $A_0$  й  $B_0$  мають такий вигляд:

$$A_{0} = \left\{ \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \frac{y \left[ y + K^{-1} (1 - \cos x) - \gamma^{*} \right] \exp\left\{ \left[ y + K^{-1} (1 - \cos x) - \gamma^{*} \right] / t_{2D} \right\}}{\left\{ \exp\left\{ \left[ y + K^{-1} (1 - \cos x) - \gamma^{*} \right] / t_{2D} \right\} + 1 \right\}^{2} \sqrt{2y + 4\pi K^{-2} n_{0} a^{3} \sin^{2} x} dx dy \right\}^{2} \times \left\{ \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \frac{y \exp\left\{ \left[ y + K^{-1} (1 - \cos x) - \gamma^{*} \right] / t_{2D} \right\}}{\left\{ \exp\left\{ \left[ y + K^{-1} (1 - \cos x) - \gamma^{*} \right] / t_{2D} \right\} + 1 \right\}^{2} \sqrt{2y + 4\pi K^{-2} n_{0} a^{3} \sin^{2} x} dx dy \right\}^{-1} \right\}^{-1}$$
(3)

$$B_{0} = \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \frac{K^{-1}(1-\cos x)+y-\gamma^{*}}{t_{2D}^{2}} \cdot \frac{\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}}{\left\{\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}+1\right\}^{2}} \times \frac{y\left[y+K^{-1}(1-\cos x)\right]dxdy}{\sqrt{2y+4\pi K^{-2}n_{0}a^{3}\sin^{2}x}} + \left\{\int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \frac{y\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}}{\left\{\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}+1\right\}^{2}\sqrt{2y+4\pi K^{-2}n_{0}a^{3}\sin^{2}x}}dxdy\right\}} \times$$

$$\times \left\{\int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\pi} \frac{y\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}+1\right\}^{2}\sqrt{2y+4\pi K^{-2}n_{0}a^{3}\sin^{2}x}}dxdy\right\}^{-1} \times \int_{0}^{\infty} \frac{x^{2}\pi K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}}{t_{2D}} \cdot \frac{\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}}{\left\{\exp\left\{\left[y+K^{-1}(1-\cos x)-\gamma^{*}\right]/t_{2D}\right\}+1\right\}^{2}\sqrt{2y+4\pi K^{-2}n_{0}a^{3}\sin^{2}x}}dxdy\right\}^{-1} \times$$

$$\times \frac{y\left[y+K^{-1}\left(1-\cos x\right)\right]dxdy}{\sqrt{2y+4\pi K^{-2}n_0a^3\sin^2 x}}$$

У формулах (2) – (4) введено такі позначення:  $c_l$  – оберненопропорційна до температури граткова теплопровідність НГТЕМ, l – обернено пропорційна до температури довжина вільного пробігу носіїв заряду в НГТЕМ,  $\zeta_{02D} = n_0 a h^2 / 4 \pi m^*$ ,  $n_0$  – об'ємна концентрація носіїв заряду в НГТЕМ,  $K = \zeta_{02D} / \Delta$ ,  $k_B$  – постійна Больцмана,  $t_{2D} = k_B T / \zeta_{02D}$ . Нормований на величину  $\zeta_{02D}$  хімічний потенціал  $\gamma^*$  підсистеми вільних носіїв заряду в НГТЕМ визначається з рівняння сталості їх концентрації:

$$\frac{t_{2D}}{\pi} \int_{0}^{\pi} \ln \left[ 1 + \exp\left(\frac{\gamma^* - K^{-1}(1 - \cos x)}{t_{2D}}\right) \right] - 1 = 0.$$
(5)

Відзначимо, що теплопровідність визначалася за умови відсутності струму. Але при цьому тепло Пельтьє не враховувалося, оскільки ми вважали, що в нас наявна провідність одного типу, наприклад, електронна [17].

Результати розрахунків безрозмірної термоелектричної ефективності «модельного» НГТЕМ з ефективною масою електрона  $m^* = m_0$ , об'ємною концентрацією вільних носіїв заряду  $n_0 = 3 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup> за різних ступенів відкритості ПФ  $0.01 \le K \le 1$  і двох різних значеннях *а* для температур  $T = T_c = 300$  K,  $T = T_h = 300$  K, а також ККД генератора на основі даного НГТЕМ наведені на рис.1.

Зауважимо, що значення K < 1 відповідають замкненим ПФ, K = 1 – перехідний ПФ, і K > 1 – відкритим ПФ. Так званому «двовимірному» випадку відповідають значення K >> 1.



Рис. 1. Залежності безрозмірної термоелектричної ефективності НГТЕМ за T = 300 К (криві 1) і T = 500 К (криві 2) а також ККД генератора за відповідних крайніх температур (криві 3) зі значеннями відстаней між шарами НГТЕМ, рівними відповідно 3 нм (а) і 15 нм (б).

ККД генератора під час побудови графіків обчислювався за формулою

$$\eta = \frac{1}{1 + 2\sqrt{0.5(Z_c T_c + Z_h T_h)}(Z_h T_h)^{-1}} \cdot \frac{T_h - T_c}{T_h} \,. \tag{6}$$

З рисунка видно, що добротність НГТЕМ і відповідний ККД генератора досить швидко зростають зі збільшенням ступеня відкритості ПФ. Для розглянутого модельного НГТЕМ безрозмірна термоелектрична ефективність за K = 1 й a = 3 нм може досягати 30–70, але вже за a = 15 нм вона падає до значень, що не перевищують 0.25 навіть за 500 К. Відповідний ККД генератора за a = 3 нм і K = 1 досягає 34% або 0.85 від ККД циклу Карно, але за a = 15 нм падає до 4%, або 0.1 від ККД циклу Карно. Таким чином, як ступінь відкритості ПФ, так і відстань між шарами є істотними параметрами, що визначають доцільність і перспективи практичного застосування того або іншого НГТЕМ.

Повністю аналогічно визначався холодильний коефіцієнт холодильника між температурами  $T_c = 230$  K,  $T_h = 300$  K.

При цьому використовувалася формула

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{1 + 0.5(Z_c T_c + Z_h T_h)} - T_h / T_c}{\sqrt{1 + 0.5(Z_c T_c + Z_h T_h)} + 1} \cdot \frac{T_c}{T_c - T_h}.$$
(7)

Результати цих розрахунків наведено на рис. 2.



Рис. 2. Залежності безрозмірної термоелектричної ефективності НГТЕМ за T = 300 K (криві 1) і T = 230 K (криві 2), а також холодильного коефіцієнта холодильника за відповідних крайніх температур (криві 3) зі значеннями відстаней між шарами НГТЕМ, рівними відповідно 3 нм (а) і 6 нм (б).

З рис. 2 видно, що за оптимальної комбінації параметрів НГТЕМ холодильний коефіцієнт холодильника за температури гарячої сторони 300 К та перепаді температур, рівному 70 К, різко зростає зі збільшенням ступеня квазідвовимірності НГТЕМ і при оптимальній комбінації параметрів у випадку перехідної ПФ може досягати 1.9. Однак зі збільшенням відстані між шарами

понад оптимальною удвічі, тобто до 6 нм, холодильний коефіцієнт, для випадку перехідної ПФ, падає до 0.4. В обох розглянутих випадках для заданого перепаду температур є граничне значення ступеня відкритості ПФ НГТЕМ, нижче якого холодильний коефіцієнт дорівнює нулю. Зі збільшенням відстані між шарами НГТЕМ це граничне значення різко зростає.

## Про причини низької ефективності відомих або досліджуваних НГТЕМ і можливих параметрах перспективного НГТЕМ

З наведених вище результатів розрахунків ми бачимо, що для досягнення високої добротності НГТЕМ необхідна якась оптимальна комбінація його параметрів, за яких ступінь відкритості його ПФ принаймні близька до одиниці або дорівнює їй, а відстань між шарами порівняно мала. Однак найпоширеніші шаруваті й надграткові матеріали на основі систем Al-Ga-As, Si-Ge або Bi(Sb)-Te(Se), у тому числі описувані моделлю Фіваза, мають саме протилежну властивість: відстань між їх шарами досить велика, а ступінь відкритості ПФ мала. Ця властивість корисна для спеціальної електроніки [9], у тому числі й для матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, використовуваних у специфічних елементах, приладах і системах, наприклад, НВЧ-підсилювачах і генераторах електромагнітних хвиль, оптичних системах із самоіндукованою прозорістю, солітонних і брізерних генераторах, фільтрах і лініях затримки і т.п. Однак такі матеріали, як видно, не завжди придатні для термоелектричних застосувань, у всякому разі, якщо мова йде про генератори і холодильники. Таким чином, правильний підхід у цьому випадку повинен би полягати не в простому перенесенні відомих надграткових матеріалів з електроніки в термоелектрику, а в пошуку або створенні спеціальних НГТЕМ, особливо таких, що не містять телур. Це тим більше актуально тому, що запаси телуровмістних руд і мінералів на Землі обмежені, телур є тільки побічним продуктом їх переробки, а сфера застосування термоелектрики, і, отже, виробництво термоелектричних модулів у світі безупинно розширюється. Більше того, основним споживачем телуру сьогодні (більше як 50% наявної кількості) є не термоелектрика, а металургія. У зв'язку з цим виникає, зокрема, питання, чи можуть існувати хоча б у принципі, високодобротні НГТЕМ з більшими відстанями між шарами. Проведений нами аналіз показав, що якщо концентрацію вільних носіїв заряду в розглянутому нами модельному НГТЕМ, знизити до  $n_0 = 3 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup>, то за a = 30 нм,  $m^* = m_0$ , K = 1 (це відповідає півширині мінізони  $\Delta = 2.16 \cdot 10^{-4}$  eB і відношенню поздовжньої ефективної маси носіїв заряду до поперечної, рівному 0.393) між температурами 300 і 500 К, можна одержати ККД генератора рівний 37.5%, що досить близько до ККД циклу Карно. Холодильний же коефіцієнт між температурами 230 і 300 К можна підвищити до 2.92. Однак ПФ такого високоефективного універсального НГТЕМ повинна мати вигляд, показаний на рис. 3, а його зонні параметри – мати високу температурну стабільність.



Рис. 3. Поверхня Фермі можливого перспективного високодобротного НГТЕМ. Перетин такої ПФ площиною, паралельною шарам НГТЕМ– коло, вісь С перпендикулярна шарам.

Розрахунки також показують, що такий НГТЕМ, будь він створений, можна було б застосувати й для наступного більш глибокого охолодження, наприклад від 230 до 100 К, але при цьому холодильний коефіцієнт становив би 0.61.

З метою порівняння пропонованого (нехай поки гіпотетичного) НГТЕМ з відомими відзначимо, що в переважній більшості їх півширина мінізони становить порядку 0.06–0.1eB [9], що в 300–500 разів перевершує пропоноване розрахункове значення цієї півширини. Більше того, для роботи електронного обладнання, що принципово використовують специфічну непараболічність зонного спектра, описуваного моделлю Фіваза, немає необхідності в повному заповненні вузької мінізони за абсолютного нуля температури. Суть справи в тому, що для роботи зазначеного обладнання важлива порівнюваність півширини мінізони не з енергією Фермі, а з енергією, що набирається носієм заряду від електричного поля упродовж періоду надгратки, тобто на відстані між сусідніми тотожними шарами.

Можна показати, що створити високоефективний НГТЕМ на основі, наприклад, кремнію, у принципі неможливо. Насправді для того, щоб це було можливим, відстань між шарами НГТЕМ повинна задовольняти умові  $a = 4\pi m^* \Delta/n_0 h^2$ . При цьому  $\Delta$  у всякому разі є величина порядку ширини забороненої зони  $E_g$ , а то й більше неї, тому що в традиційних розрахунках  $\Delta$  передбачається нескінченним, а ПФ уявляється такою, що складається з однакових еліпсоїдів. Тому, підставивши відомі параметри для кремнію, а саме,  $m^* = 1.26m_0$ ,  $E_g = 1.21$  eB, за  $n_0 = 10^{15}$  см<sup>-3</sup> одержимо a = 6.3 мм. Зрозуміло, що таких НГТЕМ бути не може. Ситуація не занадто зміниться, навіть якщо, приміром, буде  $n_0 = 3 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup>. У цьому випадку має бути a = 210 нм, у той час як НГТЕМ на основі *Si-Ge* мають найбільше aблизько 30 нм, а найбільша безрозмірна термоелектрична ефективність їх не перевищує 0.75 при a = 7 нм і концентрації  $n_0 = 3 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup>, що, як уважається, на порядок більше безрозмірної термоелектричної ефективності масивних зразків. У першому випадку ступінь відкритості ПФ становить 0.16, а в другому – 0.011. Це, зрозуміло, досить далеко від необхідного значення ступеня квазідвомірності високоефективного НГТЕМ, рівного одиниці.

Точно також, якби за  $n_0 = 3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , a = 3 нм,  $m^* = m_0$  телурид вісмуту був однодолинним НГТЕМ, що підкоряється моделі Фіваза, то ступінь відкритості його ПФ становила б  $K = 0.81\pi$  і величина безрозмірної термоелектричної ефективності за 300 К дорівнювала б 30.9. Однак, насправді, беручи до уваги, що ширина забороненої зони цього матеріалу дорівнює 0.13 еВ, і, отже, ширина дозволеної зони є порядку 1.3еВ (це необхідно для справедливості традиційних підходів, заснованих на параболічному зонному спектрі), ми маємо K = 0.017, і, отже, значення безрозмірної термоелектричної ефективності за 300 К, рівне 0.531, що цілком співвідноситься з експериментальними даними [18] для генераторних матеріалів. Для холодильних матеріалів системи Bi(Sb)-Te(Se) це значення дорівнює 0.78 [19], чому відповідає K = 0.024. Таким чином, у холодильних матеріалах непараболічність виражена трохи сильніше, ніж у генераторних. Але ці значення майже в 40–60 разів менші значення K для «дійсного» високоефективного НГТЕМ. Виходить, що традиційні генераторні й холодильні матеріали – це теж НГТЕМ, але з досить малим ступенем відкритості ПФ, і, отже, непараболічності.

Таким чином, ми бачимо, що порівняно низьку ефективність наявних НГТЕМ можна пояснити тим, що вони не мають необхідної для високої добротності комбінації параметрів, а

їх ПФ значно відрізняються від зображеної на рис. 3. Високоефективні НГТЕМ повинні відрізнятися від наявних тим, що їх мінізони мають бути настільки вузькими, щоб непараболічність, описувана моделлю Фіваза, була добре вираженою за малих концентрацій вільних носіїв заряду. Заборонені ж зони, навпаки, мають бути досить широкими, щоб у режимі генерації не «залізти» в область власної провідності, оскільки це може знизити термоелектричну ефективність матеріалу. Автор статті розуміє, що така вимога, очевидно, технологічно нелегко здійсненна, але йому невідомий який-небудь фундаментальний фізичний закон або принцип, на підставі якого цю вимогу можна було б оголосити нездійсненною.

# Про методики пошуку перспективних НГТЕМ за допомогою квантуючих магнітних полів

Виходячи з вищесказаного, можна рекомендувати такі чотири методики пошуку перспективних НГТЕМ, у тому числі описуваних моделлю Фіваза, за допомогою квантуючих магнітних полів:

- 1. Дослідження осциляцій Шубнікова де Гааза у квазікласичних магнітних полях за гелієвих температур [20-22], що включає аналіз залежності амплітуди осциляцій від поля.
- 2. Відбір матеріалів щодо наявності ділянки негативного поздовжнього магнітоопору й вираженого його мінімуму в ультраквантових магнітних полях, якщо такі досяжні [20, 22, 23].
- 3. Відбір матеріалів за ступенем заокругленості піка фактора потужності в ультраквантових магнітних полях [20, 21, 24, 25].
- 4. Відбір матеріалів за ступенем виразності негативного поздовжнього магнітоопору за більш високих температур [20, 21, 26].

Зазначені методики мають бути доповнені вимірюванням концентрації вільних носіїв заряду за допомогою ефекту Холла й рентгеноструктурним контролем міжшарової відстані.

## Висновки

- 1. Високодобротні НГТЕМ, призначені для застосування у створенні термоелектричних перетворювачів енергії повинні мати ПФ спеціального виду.
- 2. Такі НГТЕМ мають мати оптимальну комбінацію параметрів, зокрема концентрації вільних носіїв заряду й відстані між шарами, і мати досить вузькі мінізони провідності, для того, щоб непараболічність, описувана моделлю Фіваза, була добре вираженою за малих концентрацій носіїв заряду.
- 3. При створенні або пошуку таких НГТЕМ для ідентифікації їх ПФ можуть бути застосовані методики, засновані на дослідженні поздовжньої електропровідності й фактора потужності у квантуючих магнітних полях з індукціями до декількох Тл як за гелієвих, так і при азотних або кімнатних температурах. При цьому квантуюче магнітне поле, електричне поле й градієнт температури мають бути перпендикулярні шарам НГТЕМ.

Автор вдячний головному науковому співробітникові Вихор Л.М. за корисне конструктивне обговорення результатів роботи.

## Література

1. Анатычук Л.И. Функционально-градиентные материалы. / Л.И. Анатычук, Л.Н. Вихор // Термоэлектричество, т.IV. –

- 2. О влиянии туннелирования на эффективность термоэлектрических устройств. / Н.С. Лидоренко, В.А. Андрияко, Л.Д. Дудкин [и. др.] // Допов. АН СССР 186, 1969, 1295.
- 3. Casian A., Dusciak V., Coropceanu Iu. Huge carrier mobilities expected in quasi-one-dimensional organic crystals. Phys. Rev. B, 66, 2002, 165404, 1-5.
- 4. Касіян А.І. Зменшення числа Лоренца як новий напрямок підвищення *ZT* у квазіодномірних органічних кристалах. / А.І. Касіян, І.І. Балмуш, В.Г. Дущак // Термоелектрика, 2011, №3, 19.
- 5. Влияние рассеяния на границах на теплопроводность наноструктурированного полупроводникового материала  $Bi_xSb_{2-x}Te_3$ . / Л.П. Булат, И.А. Драбкин, В.В. Каратаев [и. др.] ФТТ **52**, 2010, 1712.
- 6. Анатычук Л.И. Физика термоэлектричества. Термоэлектричество, т.І.: Институт термоэлектричества. / Л.И. Анатычук // Черновцы 2008. 404с.
- 7. Heremans J.P. Low dimensional thermoelectricity. Proceedings of XXXIV International School of Semiconducting Compounds. Jaszowiec-2005. Acta Physica Polonica, 2005, v.108, No4, 609-634.
- 8. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Sun X., Zhang Z., Cronin S.B., Koga T. Low dimensional thermoelectric materials. ФТТ, 1999, т.41, вып.5, с.755-758.
- 9. Басс Ф.Г. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. / Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов // М:Наука, 1989, 288с.
- Liu W.L., Borca-Tasciuk T., Liu J.L., Taka K., Wang K.L., Dresselhaus M.S., Chen G. In-plane thermoelectric properties of Si/Ge superlattice. – Proc. of 20<sup>th</sup> International Conference on Thermoelectrics (2001). – P.340-343.
- Venkatasubramanian R., Siivola E., Colpiits T.S. In-plane thermoelectric properties of freestanding *Si/Ge* superlattice structures. – Proc. of 17<sup>th</sup> International Conference on Thermoelectrics (1998). – P.191-197.
- Lambrecht A., Beyer H., Nurnus J., Künzel C., Böttner H. High figure of merit ZT in *PbTe* and *Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>* based superlattice structures by thermal conductivity reduction. Proc. of 20<sup>th</sup> International Conference on Thermoelectrics (2001). P.335-339.
- B. Yang, J. Liu, K. Wang, G. Chen. Characterization of cross-plane thermoelectric properties of *Si/Ge* superlattices. Proc. of 20<sup>th</sup> International Conference on Thermoelectrics (2001). P.344-347.
- Zhang Y., Vashaee D., Singh R., Shakouri A. Influence of doping concentration and ambient temperature on cross-plane Seebeck coefficient of InGaAS/InAlAs superlattices. – Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 2004. – V.793. – P.59-65.
- Caylor J.C., Coolney K., Stuart J., Nangoy S., Colpiits T., Venkatasubramanian R. Developing *PbTe*based superlattice structures with enhanced thermoelectric performance. -2005 International conference on thermoelectrics. – P.489-491.
- 16. Fivaz R.F. Theory of layered structures. J. Phys. Chem. Solids. 1967. Vol.26, No5. P.839-845.
- 17. Hinsche N.F., Mertig I., Zahn P. Lorenz function of *Bi*<sub>2</sub>*Te*<sub>3</sub>/*Sb*<sub>2</sub>*Te*<sub>3</sub> superlattices. J. of Electron. Mat. 2013. –Vol.42, No7. P.1406-1410.
- Гольцман Б.М. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе *Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>*. / Б.М. Гольцман, В.А. Кудинов, И.А. Смирнов // М: Наука. 1972. 320с.
- Ivanova L.D., Granatkina Yu.V., Dauscher A., Lenoir B., Sherrer H. Influence of the purity and perfection of Czochralski-grown single crystals of bismuth and antimony chalcogenides solid solution on their thermoelectric properties. – Proc. of 5<sup>th</sup> European Workshop on Thermoelectrics. – Pardubice, Czech Republic, 1999. – P.175-178.
- 20. Gorskyi P.V. Layered structure effects as realization of anisotropy in magnetic, galvanomagnetic and thermoelectric phenomena. –New York: Nova Publishers. 2014. 366c.

- 21. Горський П.В. Діагностика функціональних матеріалів із замкненими поверхнями Фермі, описуваних моделлю Фіваза, та деякі аспекти їх застосування. / П.В. Горський // Доповіді НАН України. 2014. №12. С.77-85.
- 22. Горський П.В. Електропровідність функціональних, у тому числі термоелектричних, матеріалів, що описуються моделлю Фіваза, у квазікласичній області магнітних полів. Термоелектрика. / П.В. Горський // 2014, №3 С.5-14.
- 23. Горський П.В. Чи виражені ефекти шаруватості при замкнених поверхнях Фермі? / П.В. Горський // УФЖ. –2010. –Т.55, №12. С.1297-1305.
- 24. Горський П.В. Фактор потужності шаруватого термоелектричного матеріалу із замкненою поверхнею Фермі у квантуючому магнітному полі. –УФЖ. –2013. –Т.58, №4. С.1297-1305.
- 25. Горский П.В. Диагностика функциональных материалов, описываемых моделью Фиваза, по зависимости фактора мощности от квантующего магнитного поля. / П.В. Горський // Сборник статей по материалам XX Международной заочной научно-практической конференции «Научная дискуссия. Вопросы математики, физики, химии, биологии». / П.В. Горський // №8(19). Москва-2014. Москва: Наука. Интерпериодика. С.55-60.
- 26. Gorskyi P.V. Gigantic negative magnetoresistance of nanoheterostructures, described by Fivaz model. arXiv:1503.06823v1 -10 Mar 2015. P.1-3.

Надійшла до редакції 10.07.2015