

纳米线阵列横向运输的热电特性研究^{*}

张轶群 施毅[†] 濮林 张荣 郑有

(南京大学物理系,江苏省光电功能材料重点实验室,南京 210093)

(2007 年 12 月 8 日收到,2008 年 4 月 1 日收到修改稿)

利用包络函数的平面波展开法计算准二维纳米线阵列中的电子态,获得电输运系数表达式.同时,通过合理近似考虑边界散射对声子运输的影响,计算得到了晶格热导率.以 Si/Ge 体系为例,研究了纳米线阵列横向运输的热电特性.结果表明,结构优值与费米能级、纳米线直径及间距等参数相关.通过对结构参数的调整,纳米线阵列的横向运输可有效提高热电性能.

关键词:热电性能,纳米线阵列,Seebeck 系数,晶格热导率

PACC: 7215J, 7220P, 6370, 7115A

1. 引言

热电材料是一种利用材料内部载流子运输实现热能与电能直接转换的功能材料.在能源日益紧张的今天,利用热电材料制备的发电器件由于其体积小、无污染等特点越来越受到人们的关注.同时,在趋向于极限尺度的微电子工艺中,实现器件的有效散热也给热电材料致冷带来了广阔的应用前景^[1].材料的热电性能可以用无量纲数优值 ZT 来衡量, $ZT = \sigma S^2 T / (\kappa_{ph} + \kappa_e)$,其中 σ 为材料的电导率, S 为 Seebeck 系数, κ_{ph} 和 κ_e 分别是材料的晶格热导率和电子热导率.优值越大表示材料热电性能越好,但由于一般的体材料有较低的 Seebeck 系数和较大的晶格热导率,其在室温下的热电特性并不好.

目前,对温差电材料的研究主要集中在两个方面:一是通过合成合金或复杂化合物直接获得高性能的体材料^[2-4];另外则是利用纳米结构来提升优值.1993 年,Hicks 和 Dresselhaus^[5,6]预言了利用合成的纳米结构可以实现远高于相应体材料的热电性能.理论计算已经表明,利用纳米结构中的量子限制效应可以显著地提高 Seebeck 系数和热电转换效率^[7,8].同时,纳米结构也可以降低材料的晶格热导率^[9-11].因为在纳米尺度下声子由扩散运输转化为弹道运输,其平均自由程会变小从而降低晶格热导率.因此,合成高功率因子(σS^2)、低晶格热导率的纳

米结构成为低维热电材料发展的主要方向^[12].目前,大量的实验结果^[13-15]也证实了纳米结构可以显著地提高热电性能.例如, $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 超晶格的 ZT 值可以在室温下达到 2.4^[13].

在众多纳米结构中,纳米线得到了广泛关注,其中对孤立纳米线的研究比较成熟.理论上已计算了纳米线材料、形状以及尺度等因素与热电性能的关系^[16-18].实验上,诸如 Bi_2Te_3 , Bi 等纳米线均被合成和表征.然而,实际的纳米线是大量堆积在填充材料之中,纳米线之间的耦合对热电性能的影响不容忽视^[19].大量的工作是研究电子沿纳米线方向的运输,垂直于纳米线的运输则很少被报道.其次,为了全面衡量一种功能材料的热电性能,电运输与热运输需要进行统筹考虑,然而在纳米线的研究中这两者经常被作为独立的对象来处理^[16-18].本文在考虑纳米线之间耦合的基础上,研究了纳米线阵列横向运输的热电特性.在本文所使用的模型中,我们统一考虑了电学性能和热学性能,较完备地得到了结构的热电特性与结构的特征尺寸、费米能级等参数之间的关系.

2. 理论模型

2.1. 电输运特性

图 1(a) 和 (b) 分别是纳米线阵列的结构示意图

^{*} 国家自然科学基金(批准号 90606021, 60676006)和国家重点基础研究发展规划(批准号 2007CB936300).

[†] 通讯联系人, E-mail: yshi@nju.edu.cn

和截面图. 在纳米线阵列结构中, 电输运特性依赖于电子能带结构. 假设纳米线相对填充材料为势阱, 势阱深度为 V_0 , 并使纳米线作正方排列, 则纳米线的直径为 d , 间距为 δ , 阵列中的周期长度为 $L = d + \delta$, 如图 1(b) 所示.

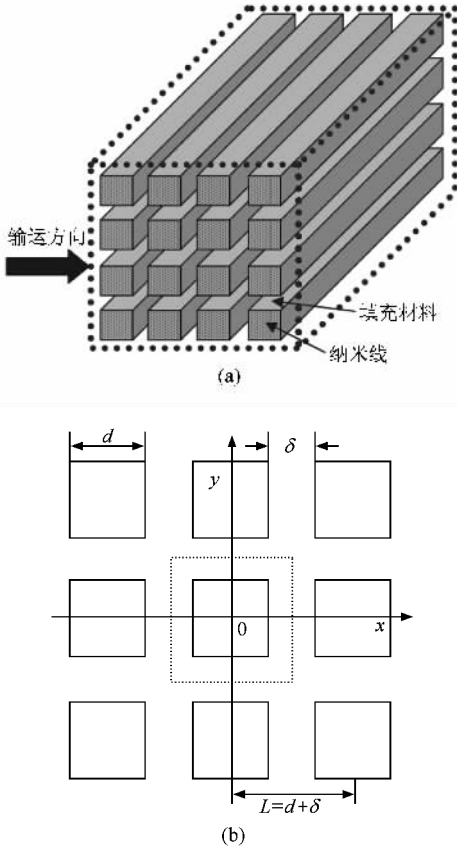


图 1 纳米线阵列结构示意图和 x - y 平面内的截面图 (a) 结构示意图 (b) x - y 平面内的截面图. 虚线框内表示纳米线阵列中的一个周期单元

包络函数的平面波展开法在计算纳米材料的电子结构、光子晶体能带等方面有着重要应用^[20-22]. 根据纳米线排列的周期性, 可利用这种方法处理其中的电子运动. 根据 Foreman 的有效质量包络函数理论并忽略高阶项的影响^[20], 电子在纳米线阵列中的波函数和运动方程如下:

$$\Psi_{(r)} = \frac{1}{\sqrt{L_z}} \exp(i k_z z) \frac{1}{L} \sum_{nm} C_{nm} \times \exp\{i[(k_x + nK_x)x + (k_y + mK_y)y]\} \left(K_x = K_y = \frac{2\pi}{L} \right), \quad (1)$$

$$H\Psi_{(r)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{(x,y,z)}^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right.$$

$$\left. + V_{(x,y,z)} \right] \Psi_{(r)} = \left(\xi_{k_{x,y}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2M_z^*} \right) \Psi_{(r)}, \quad (2)$$

其中

$$V_{(x,y,z)} = \begin{cases} V_0 (V_0 > 0) \\ \left(\frac{L}{2} < |x| < L, \frac{L}{2} < |y| < L \right), \\ 0 & \left(|x| \leq \frac{L}{2}, |y| \leq \frac{L}{2} \right), \end{cases} \quad (3)$$

$$m_{(x,y,z)}^* = \begin{cases} m_2^* \\ \left(\frac{L}{2} < |x| < L, \frac{L}{2} < |y| < L \right), \\ m_1^* & \left(|x| \leq \frac{L}{2}, |y| \leq \frac{L}{2} \right). \end{cases}$$

这里 m_1^* 是纳米线材料的有效质量张量, m_2^* 是填充材料的有效质量张量; V_0 是纳米线材料和填充材料导带边的差值, 一般情况下取 $V_0 > 0$; L_z 则是纳米线 z 方向上的长度. 由于电子在 z 方向上的运动是自由的, 因此约化的 z 方向上有效质量可取如下形式:

$$M_z^* = \frac{\gamma^2}{m_{z1}^*} + \frac{1 - \gamma^2}{m_{z2}^*},$$

其中 $\gamma = d/L$.

将 (1) 式的波函数代入 (2) 式, 然后通过对角化哈密顿矩阵可以得到能量 E 与波矢 k 的色散关系^[21]. 利用色散关系 $E-k$, 根据 Boltzmann 的输运理论, 就可以得到系统相应的输运系数^[23]

$$L^\alpha = e^2 \tau \int \frac{dk}{4\pi^3} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) v_x^2 (E_k - E_F)^\alpha,$$

$$\sigma = L^0,$$

$$S = -\frac{L^1}{eTL^0}, \quad (4)$$

$$\kappa_e = \frac{L^2}{e^2 T}.$$

这里 v_x 为输运方向上的电子速度,

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k_x},$$

f 是电子的 Dirac-Fermi 分布函数. 为计算简便, 采用体材料中的弛豫时间 τ 作近似计算. 弛豫时间 τ 可以利用体材料中的电子迁移率计算得到^[24]. 另外, 在具体计算时将超晶格中对微带色散关系的近似表达式^[25]推广到二维系统, 并应用于平面波方法, 从而计算结构的色散关系.

2.2. 热输运特性

对纳米结构中的声子输运有两种基本模型. 一

种是波动模型,认为声子的色散关系在纳米尺度下会发生变化,进而计算修正的声子能谱^[26].另一种即为声子的边界散射理论,认为晶格热导率的降低源于频繁的边界散射^[9-11].根据这一模型,Dames等^[11]对纳米线阵列的横向热传导做了数值计算,得到了晶格热导率与结构尺寸的关系.本文同样利用声子的边界散射理论,采取唯象模型,推导纳米线阵列横向晶格热导率的解析解,并获得相应的特性曲线.

图2是纳米线阵列中声子受到的边界散射及唯象模型中的热流示意图.从图2可以看出,宏观上只存在 x 方向上的热流,因此可近似认为等温线垂直于 x 方向.由于纳米线阵列的周期性,在垂直于输运方向上可分割成层状结构,只需计算单元层的热导率,从而将问题简化为一维的热传导问题.边界散射主要来源于垂直界面的散射和平行界面的散射^[11],如图2中的小箭头所示.因此,在计算中需将这两种额外的散射机制考虑进来.穿过纳米线间距的热流密度 q_2 与透过纳米线内部传播的热流密度 q_1 符合关系

$$q_1 \gamma + q_2 (1 - \gamma) = q,$$

其中 q 是流经 x 方向的平均热流密度.

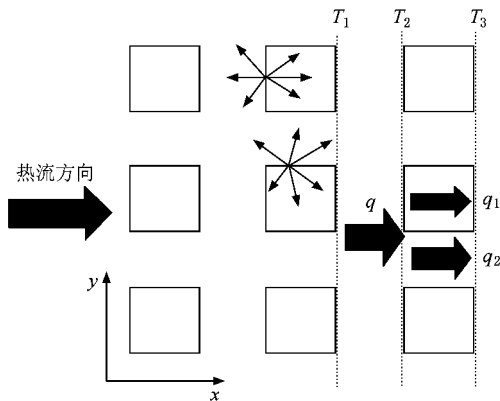


图2 纳米线阵列中的热流示意图 T_1, T_2, T_3 分别是三条等温线的温度,两组小箭头表示声子受到的边界散射

由于从纳米线之间穿过的声子流只受到平行方向上的界面散射,因而有^[9]

$$\begin{aligned} q_2 &= -\kappa'_2 \frac{\Delta T}{\Delta L} \\ &= \kappa'_2 \frac{(T_2 - T_3)}{d}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\kappa'_2 = \kappa_2 \left[1 - \frac{3\Lambda_2}{2d} \left(\frac{1}{4} - E_{x(\xi_2)} + E_{x(\xi_2)} \right) \right]. \quad (6)$$

这里 κ_2 是填充材料的体晶格热导率(6)式表示由

于平行散射带来的热导率修正; Λ_2 是填充材料的声子平均自由程; $E_{x(\xi)}$ 是 e 指数积分函数^[27],其中

$$\xi_2 = d/\Lambda_2.$$

对于透过纳米线传播的声子流,情况相对要复杂些,声子不仅在纳米线内部受到平行界面散射,同时也要考虑垂直界面的散射.可近似认为这两种散射等效于两个串联的热阻^[11]

$$\begin{aligned} q_1(\rho_{//} + \rho_{\perp}) &= q_1 \left(\frac{d}{\kappa'_1} + \rho_{\perp} \right) \\ &= T_2 - T_3, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\kappa'_1 = \kappa_1 \left[1 - \frac{3\Lambda_1}{2d} \left(\frac{1}{4} - E_{x(\xi_1)} + E_{x(\xi_1)} \right) \right], \quad (8)$$

其中 κ_1 和 Λ_1 分别对应纳米线材料的体热导率和声子平均自由程,

$$\xi_1 = d/\Lambda_1.$$

而对于垂直界面的热阻,Dames等给出了解析表达式^[11,24]

$$\rho_{\perp} = \frac{4(c_1 v_1 + c_2 v_2)}{c_1 v_1 c_2 v_2},$$

其中 $c_{1,2}$ 和 $v_{1,2}$ 分别为材料的比热容和声子平均速度.

声子在两列纳米线之间并没有受到边界散射,通过图2得到关系式

$$\begin{aligned} q &= -\kappa_2 \frac{\Delta T}{\Delta L} \\ &= \kappa_2 \frac{T_1 - T_2}{\delta}. \end{aligned} \quad (9)$$

综合各式可以得到结构的有效热导率 κ_{eff} ,

$$\begin{aligned} q &= \kappa_{\text{eff}} \frac{T_1 - T_3}{L} \\ &= \frac{1}{(1 - \gamma)\kappa_2 + \gamma \left[\gamma \kappa'_1 + (1 - \gamma)\kappa'_2 \right]} \\ &\quad \times \frac{T_1 - T_3}{L}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中

$$\frac{1}{\kappa'_1} = \frac{1}{\kappa_{\perp}} + \frac{1}{\kappa'_1}, \quad (11)$$

$$\kappa_{\perp} = \frac{c_1 v_1 c_2 v_2 d}{4(c_1 v_1 + c_2 v_2)}. \quad (12)$$

因而,利用(10)式可以计算出纳米线阵列中的有效晶格热导率与结构特征尺寸的关系.

3. 结果及讨论

与现代微电子工艺的兼容性使 Si/Ge 体系成为

热电材料中的研究热点. 最新报道的 Ge 材料填充以 Si 纳米颗粒的结构可以在室温下使优值提高到 0.1—0.2^[7]. 同时, 相比于含铅盐和铋系化合物, Si/Ge 体系具有毒性小, 异质界面质量好等特点. 因此, 本文就 Si/Ge 体系对理论模型作具体的分析. 为了简便起见, 不考虑应力对能带结构的影响, 计算中取 Si 为纳米线材料, Ge 作为填充材料. 对于 Ge, Si 的导带而言, 它们在 Δ 能谷上是六重简并的, 其中 Ge 的 Δ 能谷比 Si 高 360 meV, 即 $V_0 = 360$ meV.

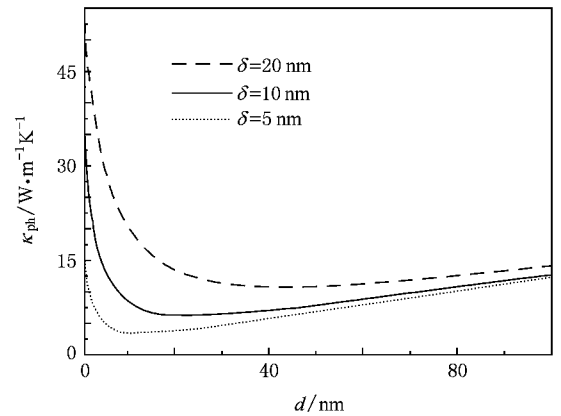
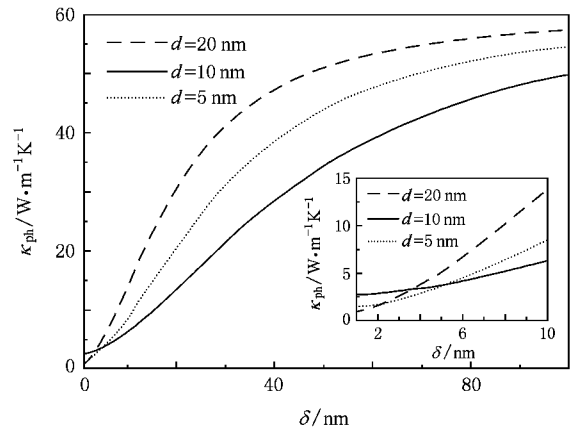
表 1 Si 和 Ge 的各项运输系数

	m_l/m_0	m_{\parallel}/m_0	$\mu/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$C/10^5 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$	$v/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$\Delta_{\text{ph}}/\text{nm}$	$\kappa_{\text{ph}}/\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Si	0.19	0.92	1450	9.3	1804	268	150
Ge	0.082	1.59	3600	8.7	1042	198	60

图 3 给出了结构的晶格热导率与纳米线直径的关系. 从图 3 可以看出, 在确定任意的纳米线间距时, 热导率随纳米线直径的增大均有一个先下降再上升的过程, 热导率的最小值取决于选定的纳米线间距. 因为当纳米线直径很小时, 虽然垂直界面引起的热阻很大, 但同时阵列的线密度 $\gamma = d/L$ 很小, 则垂直透过纳米线传播的热流在总热流中所占比例很小, 因而总的热导率很高. 当纳米线直径增大时, 线密度也会上升, 垂直界面散射的增强使热导率下降到极小值. 当纳米线直径继续增大时, 垂直界面散射引起的热导率 κ_L 会升高, 而线密度的影响转为其次, 热导率又会上升. 图 4 给出了结构的晶格热导率与纳米线间距的关系. 在纳米线间距和纳米线直径可比拟的时候, 线密度越低热导率越大. 只有当纳米线间距较大时, 热导率与纳米线间距和直径的尺度才呈正比, 热导率会不断趋于填充材料 Ge 的体热导率 ($60 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$). 总体而言, 纳米线阵列内部的边界散射显著降低了晶格热导率, 从而能够提升体系的优值.

图 5 显示了 $d = 5 \text{ nm}$, $\delta = 2 \text{ nm}$ 时体系优值 ZT 和 Seebeck 系数 S 随费米能 E_F 的变化情况. 费米能 E_F 的零点选定为 Si 的导带边. 从图 5 可以看出, 随着费米能的提高, Seebeck 系数振荡下降, 这是由于纳米线阵列中尖锐的态密度分布所致. 优值后两个极大值与 Seebeck 系数极大值所对应的费米能基本相同, 表明量子限制效应对 Seebeck 系数的提高是优值上升的主要原因. 但同时也可以看出, 这两个极大值差别很大, 这是由于边界散射降低了晶格热导率, 因此必须考虑电子热导率对优值的影响, 虽然在

由于 Si, Ge 中 L 能谷的位置相应地比 Δ 能谷高, 因此在计算中可以只考虑 Si, Ge 的 Δ 能谷耦合^[28], 即 Si 纳米线相对于 Ge 为势阱. 同时取 m_{\perp} 为纳米线垂直方向上运输的有效质量, m_{\parallel} 为沿纳米线方向上的有效质量, 这可以通过控制 Si/Ge 体系的生长晶向来实现. 文献[10, 28, 29]给出了 Si, Ge 各输运系数的取值, 如表 1 所列. 其中 v 和 Δ_{ph} 分别是体材料中声子的平均速度和平均自由程.

图 3 晶格热导率与纳米线直径 d 的关系图 4 晶格热导率与纳米线间距 δ 的关系 内插图为局部放大

半导体体材料中这个影响很小. 如图 5 的内插图所示, 随着费米能的升高, 电子热导率也逐渐上升, 甚至超过了晶格热导率 (计算得到此时的晶格热导率为 $1.58 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), 对优值的上升起到很大的抑制

作用.因此,晶格热导率变小使得电子热导率对优值的影响变大,从而使得优值的两个峰位表现出明显的差别.

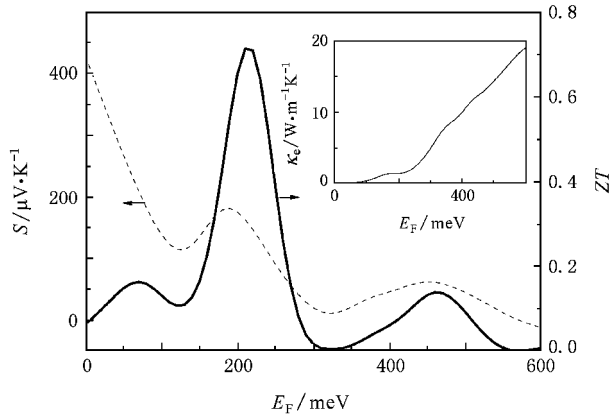


图5 Seebeck系数和优值与费米能的关系.内插图为相应的电子热导率的变化曲线. $d = 5 \text{ nm}$, $\delta = 2 \text{ nm}$

从图5可以看出优值的大小与费米能密切相关,适当选择费米能级的位置(即掺杂程度)可获得最佳的优值.图6是最佳优值 ZT_{opt} 与纳米线间距 δ 之间的关系,其中 $d = 5 \text{ nm}$.从图6可看到,随着纳米线间距的减小,优值开始缓慢变大,然而当纳米线间距小于 4 nm 后,优值会迅速升高.这是由于纳米线间距对微能带宽度的影响造成的.图6中的内插图是 $d = 5 \text{ nm}$, $\delta = 5 \text{ nm}$ 时的电子态密度,由此可以看出第二个态密度峰是最高值.纳米线阵列的量子限制效应发生在 x - y 平面,是准二维体系,因此在一些子能带上存在二重简并,使得相应的态密度峰很高,与量子点体系相似^[30].当 $\delta > 4 \text{ nm}$ 时,纳米线之间的耦合并不强烈,这个子能带的宽度很窄只能提供很低的电子迁移率,尽管其可提供更大的 Seebeck 系数和更多的电子,但对优值的贡献受限于有限的电导.当 $\delta < 4 \text{ nm}$ 时,纳米线之间的耦合加强,子能带随之变宽,迁移率上升使相应的电导率也上升,因此当费米能落在这个子能带能量附近时会产生最大的优值,如图5中的优值变化曲线所示.

图7是 $\delta = 5 \text{ nm}$ 时最佳优值 ZT_{opt} 随纳米线直径 d 的变化曲线.从图7可以看出,随着纳米线直径的减小,最佳优值发生振荡变化.这是由于改变纳米线直径即改变了各个子能带的位置和间距,从而使态密度分布发生了变化,而改变纳米线间距只是改变子能带的宽度,子带的位置基本不会变化.这种振荡和其他纳米结构相似^[24].一般情况下,减小量子线、量子阱或量子点的尺度均会使优值上

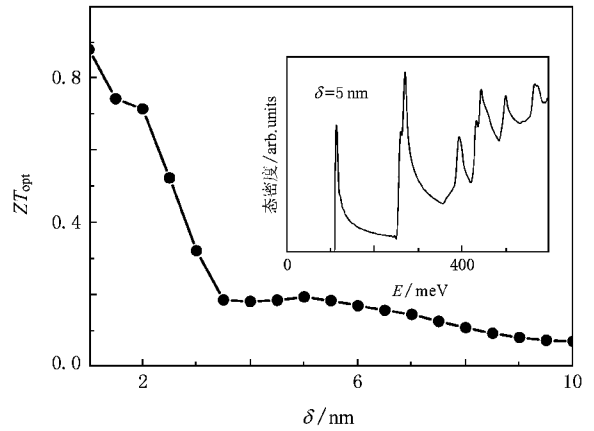


图6 当 $d = 5 \text{ nm}$ 时,最佳优值 ZT_{opt} 与纳米线间距 δ 的关系

升^[5,6,24].然而在纳米线横向运输中我们并没有得到相似的结果.这一特征与晶格热导率的变化有关.如上所述,在确定纳米线间距的情况下,晶格热导率并非随纳米线直径作单调变化,当直径小于某临界值时晶格热导率会随直径的减小而升高.因此,随直径减小而升高的热导率使得优值的升高受限,相应的最佳优值只是发生了振荡而没有显著的增大.综合图6中的结果可认为,在纳米线阵列的横向传输中只有同时降低纳米线直径和间距才能提升优值,其中降低纳米线间距更为重要.

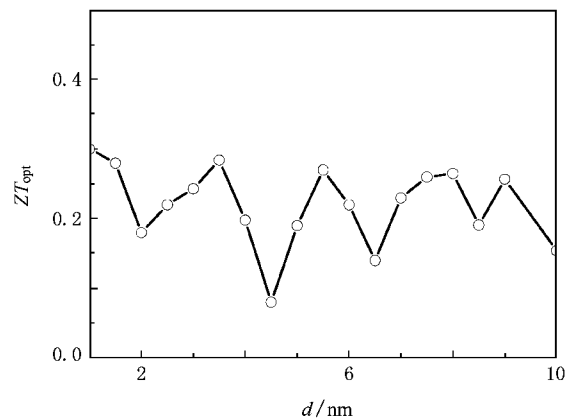


图7 当 $\delta = 5 \text{ nm}$ 时,最佳优值 ZT_{opt} 与直径 d 的关系

4. 结 论

本文利用包络函数的平面波展开法计算准二维纳米线阵列中的电子态,获得电输运系数表达式.同时,通过合理近似考虑边界散射对声子运输的影响,计算得到了晶格热导率.通过计算表明,纳米线横向运输的热电性能与沿纳米线方向不同.这种依赖于

微带传导的运输形式与量子点和超晶格类似, 而且在体系中电运输特性与热运输特性同时依赖于线密度和线直径的变化. 对于孤立的纳米线或沿纳米线方向的运输, 线直径是影响性能的主要因素. 虽然理论模型建立在对纳米线形状和排列的理想假设上, 但阐明的物性对实际的纳米线阵列也基本适用. 同样, 本文的分析方法也可应用于对量子点多层结构、

超晶格等纳米线材料的热电性能分析. 随着纳米线合成技术的不断成熟和纳米热电材料的深入发展, 本文的结果对于热电材料及器件的设计和 optimization 具有一定的指导作用.

在能带结构的计算中得到了中国科学院半导体研究所李树深研究员的具体指导, 谨表谢意.

- [1] DiSalvo F J 1999 *Science* **285** 703
- [2] Yu B L, Tang X F, Qi Q, Zhang Q J 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3130 (in Chinese) [余柏林、唐新峰、祁琼、张清杰 2004 物理学报 **53** 3130]
- [3] Jiang J, Li Y L, Xu G J, Cui P, Wu T, Chen L D, Wang G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2858 (in Chinese) [蒋俊、李亚丽、许高杰、崔平、吴汀、陈立东、王刚 2007 物理学报 **56** 2858]
- [4] Deng S K, Tang X F, Zhang Q J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4983 (in Chinese) [邓书康、唐新峰、张清杰 2007 物理学报 **56** 4983]
- [5] Hicks L D, Dresselhaus M S 1993 *Phys. Rev. B* **47** 12727
- [6] Hicks L D, Dresselhaus M S 1993 *Phys. Rev. B* **47** 16631
- [7] Dresselhaus M S, Chen G, Tang M Y, Yang R G, Lee H, Wang D Z, Ren Z F, Fleurial J P, Gogna P 2007 *Adv. Mater.* **19** 1043
- [8] Humphrey T E, Linke H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 096601
- [9] Chen G 1997 *J. Heat Transfer* **119** 220
- [10] Yang R G, Chen G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 195316
- [11] Dames C, Chen G 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 682
- [12] Khitun A, Wang K L, Chen G 2000 *Nanotechnology* **11** 327
- [13] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597
- [14] Harman T C, Taylor P J, Walsh M P, LaForge B E 2002 *Science* **297** 2229
- [15] Lyeo H K, Khajetoorians A A, Shi L, Pipe K P, Ram R J, Shakouri A, Shih C K 2004 *Science* **303** 816
- [16] Sun X, Zhang Z, Dresselhaus M S 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 4005
- [17] Yang R G, Chen G, Dresselhaus M S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 125418
- [18] Farhangfar S 2006 *Phys. Rev. B* **74** 205318
- [19] Broido D A, Mingo N 2006 *Phys. Rev. B* **74** 195325
- [20] Foreman B A 1995 *Phys. Rev. B* **52** 12241
- [21] Li S S, Chang K, Xia J B 2005 *Phys. Rev. B* **71** 155301
- [22] Shen L F, He S L, Wu L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1133 (in Chinese) [沈林放、何赛灵、吴良 2002 物理学报 **51** 1133]
- [23] Ashcroft N W, Mermin N D 1976 *Solid State Physics* (New York : Thomson Learning) Chap 8
- [24] Lin Y M, Dresselhaus M S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 075304
- [25] Huang K, Zhu B F 1992 *Phys. Rev. B* **45** 14404
- [26] Bies W E, Radtke R J, Ehrenreich H 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 1498
- [27] Siegel R, Howell J R 2001 *Thermal Radiation Heat Transfer* (Washington : Taylor & Francis)
- [28] Dresselhaus M S 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2438
- [29] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 2004 *Physics of Semiconductor* (Beijing : Electronics Industry Press) (in Chinese) [刘恩科、朱秉升、罗晋生 2004 半导体物理学 (北京 : 电子工业出版社)]
- [30] Lazarenkova O L, Alexander A B 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5509

Thermoelectric properties of transverse transport in nanowire array structures^{*}

Zhang Yi-Qun Shi Yi[†] Pu Lin Zhang Rong Zheng You-Dou

(*Key Laboratory of Advanced Photonic and Electronic Materials of Jiangsu Province ,
Department of Physics ,Nanjing University ,Nanjing 210093 ,China*)

(Received 8 December 2007 ; revised manuscript received 1 April 2008)

Abstract

The electronic structures of nanowire-composite arrays are calculated theoretically in the framework of effective-mass envelope function theory ,and various coefficients about electronic transport are obtained. At the same time ,a closed-form expression based on boundary scattering theory for lattice thermal conductivity is presented. Then the thermoelectric properties of Si nanowire/Ge host material are investigated as function of the Fermi energy ,wire diameter and separation between nanowire sidewalls. The results show that the ZT value of nanowire-composite can be significantly increased by carefully adjusting the correlative parameters of the structure .

Keywords : thermoelectric properties , nanowire arrays , Seebeck coefficient , lattice thermal conductivity

PACC : 7215J , 7220P , 6370 , 7115A

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 90606021 , 60676006) and the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB936300).

[†] Corresponding author. E-mail : yshi@nju.edu.cn