

# Теоретические оценки фактора термоэлектрической мощности графена, капсулированного между 3D и 2D полупроводниковыми и металлическими слоями

© С.Ю. Давыдов<sup>1</sup>, О.В. Посредник<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ), 197022 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 13 сентября 2023 г.

В окончательной редакции 13 декабря 2023 г.

Принята к публикации 20 декабря 2023 г.

Определены условия экстремальности значений проводимости  $\sigma$ , коэффициента Зеебека  $S$  и фактора термоэлектрической мощности  $PF = \sigma S^2$  капсулированного графена, рассматриваемых как функции химического потенциала  $\mu$ . В качестве обкладок рассмотрены 3D и 2D полупроводники и переходные металлы. Использование простых моделей позволило получить аналитические результаты. Численные оценки выполнены для однолистного графена и объемных Si, Ge и 16 бинарных III–V и II–VI соединений, шести двумерных полупроводниковых дихалькагенидов переходных металлов и всех элементов 3d-, 4d- и 5d-рядов. Приведены рекомендации материалов обкладок, позволяющих максимизировать термоэлектрические характеристики. Кратко обсуждается также капсулированный двухслойный графен.

**Ключевые слова:** термоэлектрические характеристики, капсулированный графен, 3D полупроводники, 2D дихалькагениды переходных металлов, 3D и 2D переходные металлы.

DOI: 10.61011/FTP.2023.09.56991.5558

## 1. Введение

Для характеристики термоэлектрических свойств часто используется фактор термоэлектрической мощности  $PF = \sigma S^2$ , где  $\sigma$  — электропроводность,  $S$  — коэффициент Зеебека. В настоящее время идет активный поиск объемных (3D) [1–3] (например, PbTe, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, SnSe, CoSi, BaPS<sub>2</sub>) и двумерных (2D) [4,5] (например, GeP<sub>3</sub>, SnP<sub>3</sub>) материалов, для которых безразмерное произведение  $ZT \equiv (PF/\kappa)T > 1$ , где  $T$  — температура,  $\kappa$  — теплопроводность (в англоязычной литературе  $ZT$ , а иногда и  $Z = \sigma S^2/\kappa$  именуется figure of merit; в отечественных публикациях говорят о термоэлектрической эффективности, или критерии Иоффе). Для достижения той же цели в теории основное внимание уделяется выбору такого закона дисперсии электронов, которому соответствуют максимальные значения  $PF$  и  $ZT$  [6–10]. Так, например, рассматриваются законы дисперсии  $\varepsilon_n(\mathbf{k}) \propto k^n$  ( $n = 4, 6$ ), где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор (такие зоны в англоязычной литературе называются „pudding-mold type bands“) и комбинации зон  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  с линейным дираковским спектром. С тем же прицелом рассматривались гетероконтакты графен (Gr) — металл [11], Gr — 2D гексагональный нитрид бора (*h*-BN) [12] и Gr-полупроводник [13]. В работе [14] мы рассмотрели задачу о капсулированном графене (Gr) и получили аналитические выражения для зависимости фактора термоэлектрической мощности от химического потенциала системы  $\mu$ . В качестве примера в [14] численные

оценки выполнялись для структуры *h*-BN/Gr/*h*-BN. Было показано, что максимальные значения  $PF$  достигаются в случае, когда химический потенциал, оставаясь внутри запрещенной зоны *h*-BN, приближается к ее краям. Здесь мы рассмотрим структуры, где в качестве обкладок однолистного графена выступают 3D и 2D полупроводники Si, Ge и бинарные соединения III–V и II–VI и переходные металлы, градиент температуры направлен вдоль графенового листа.

В дальнейшем мы будем использовать так называемый адсорбционный подход к проблеме [15], который состоит в следующем. Пусть капсулируемый слой описывается функцией Грина  $g(\omega)$ , где  $\omega$  — энергетическая переменная. Влияние капсулирующих слоев 1 и 2 учитывается поляризационными операторами (или собственно-энергетическим вкладом)

$$\Sigma_{1,2}(\omega) = \Lambda_{1,2}(\omega) - i\Gamma_{1,2}(\omega),$$

где  $\Lambda_{1,2}(\omega)$  и  $\Gamma_{1,2}(\omega)$  представляют функции сдвига и уширения электронных состояний капсулируемого слоя под действием обкладок 1 и 2. При этом функция Грина капсулированного слоя равна

$$G^{-1}(\omega) = g^{-1}(\omega) - \Sigma_1(\omega) - \Sigma_2(\omega).$$

Функции  $\Lambda_{1,2}(\omega)$  и  $\Gamma_{1,2}(\omega)$  однозначно определяются энергетическими плотностями состояний (DOS) обкладок 1 и 2. Простые модели этих плотностей состояний приводят к тому, что функции  $\Lambda_{1,2}(\omega)$  и (или) их производные  $d\Lambda_{1,2}(\omega)/d\omega$  имеют расходимости, которые,

естественно, проявляются в выражениях для характеристик  $\sigma$ ,  $S$  и  $PF$ . Здесь мы должны сосредоточиться на тех особенностях, которые приводят к максимальным значениям термо-электрических (ТЕ) характеристик для однолистного графена (SLG). В *Приложении* кратко рассмотрим вопрос о капсулированном двухслойном графене (BLG).

## 2. Общие соотношения

Согласно формуле Мотта, коэффициент Зеебека равен

$$S = -(\pi^2 k_B^2 T / 3e) [d \ln \sigma(\mu, T = 0) / d\mu], \quad (1)$$

где  $e$  — элементарный заряд,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Таким образом, проблема вычисления  $PF$  сводится к определению зависимостей проводимости и ее логарифмической производной от положения химического потенциала  $\mu$  при нулевой температуре. Мы будем рассматривать однолистный графен, находящийся между полупроводниковыми обкладками 1 и 2 с запрещенными зонами  $E_{g1,2}$ , границы которых равны  $E_{C1,2}$  и  $E_{V1,2}$  (края зон проводимости и валентных зон). В дальнейшем будем считать, что  $\mu$  находится внутри результирующей запрещенной зоны, границы которой  $E_C^*$  и  $E_V^*$  определяются неравенством

$$E_V^* = \max\{E_{V1}, E_{V2}\} < E_C^* = \min\{E_{C1}^*, E_{C2}^*\}.$$

Выделение области  $(E_V^*, E_C^*)$  связано с тем, что  $PF$  графена имеет максимальные значения при  $\mu \rightarrow E_{V,C}^*$  именно в границах запрещенной зоны [14]. Согласно [14], при  $T = 0$  безразмерная статическая проводимость  $\sigma^* \equiv \sigma / (e^2 / \pi \hbar)$ , где  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка, имеет вид

$$\sigma^* = \sigma_1^* + \sigma_2^*, \quad \sigma_1^* = \frac{\xi^2 F}{F^2 + 4\tilde{\mu}^2 \gamma^2}, \quad \sigma_2^* = \frac{\tilde{\mu}^2 + \gamma^2}{2\tilde{\mu}\gamma} R, \quad (2)$$

$$R(\mu) = \arctan \frac{F}{2\gamma\mu} + \arctan \frac{\mu^2 - \gamma^2}{2\gamma\mu},$$

$$F = \xi^2 + \gamma^2 - \mu^2, \quad \mu = \mu - \bar{\Lambda}(\mu).$$

Здесь  $\bar{\Lambda}(\mu) = \Lambda_1(\mu) + \Lambda_2(\mu)$ , где  $\Lambda_{1,2}(\mu)$  — функции сдвига уровней SLG, вызванные взаимодействием с обкладками 1, 2;  $\xi = \sqrt{2\pi\sqrt{3}t}$  — энергия обрезания для спектра SLG;  $\gamma$  — уширение уровней SLG за счет собственного затухания электронных состояний; энергия точки Дирака  $E_D$  принята за нуль. В той же области  $(E_V^*, E_C^*)$  производные  $d\sigma^*/d\mu = d\sigma_1^*/d\mu + d\sigma_2^*/d\mu$  равны

$$d\sigma_1^*/d\mu = -\frac{2\xi^2 \mu C^*}{F^2 + 4\gamma^2 \mu^2} \left(1 - 2\frac{F(F - 2\gamma^2)}{F^2 + 4\gamma^2 \mu^2}\right),$$

$$\frac{d\sigma_2^*}{d\mu} = \frac{\mu^2 - \gamma^2}{2\gamma\mu^2} CR + \frac{\mu^2 + \gamma^2}{2\gamma\mu} \frac{dR}{d\mu}, \quad (3)$$

где

$$\frac{dR}{d\mu} = -4\gamma CD, \quad C = 1 - d\bar{\Lambda}/d\mu,$$

$$D = \left(\frac{\xi^2 + \gamma^2}{F^2 + 4\gamma^2 \mu^2} - \frac{1}{2(\mu^2 + \gamma^2)}\right). \quad (4)$$

В работе [14] анализируются зависимости  $\sigma^*(\mu)$ ,

$$L(\mu) = d \ln \sigma^* / d\mu \propto S$$

и

$$PF^*(\mu) = (\sigma^*)^{-1} (d\sigma^*/d\mu)^2 \propto \sigma S^2$$

(где функция  $PF^*(\mu)$  обозначена как  $Z^*(\mu)$ ). Обсуждаются также экстремумы функций  $L(\mu)$  и  $PF^*(\mu)$ , положения которых  $\pm\mu_{\text{ext}}^L$  и  $\pm\mu_{\text{ext}}^{Z^*}$  определяются соответственно из уравнений

$$\sigma^* (d^2\sigma^*/d\mu^2) = (d\sigma^*/d\mu)^2$$

и

$$2(d^2\sigma^*/d\mu^2) = (d\sigma^2/d\mu)^2.$$

Здесь мы, однако, не приводим соответствующие громоздкие формулы. Для исследования конкретных структур необходимо задать density of states of semiconductors (DOSs) обкладок 1 и 2 и соответствующие функции сдвига и уширения.

## 3. 3D обкладки

### 3.1. Полупроводниковые обкладки

Используем модель [16], согласно которой DOS полупроводника  $\rho_{sc}(\omega)$  можно представить в следующем виде [17]:

$$\rho_{sc}(\Omega) = \begin{cases} A_C \sqrt{\Omega - E_g/2}, & E_g/2 < \Omega \leq W_C + E_g/2, \\ A_V \sqrt{-\Omega - E_g/2}, & -W_V - E_g/2 \leq \Omega < -E_g/2, \\ 0, & |\Omega| \leq E_g/2, \quad |\Omega| > W_{C,V} + E_g/2. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $\Omega = \omega - \omega_0$ , где  $\omega_0$  — энергия центра запрещенной зоны относительно точки Дирака;  $A_{C,V}$  — коэффициенты,  $W_{C(V)}$  — ширина зоны проводимости (валентной зоны). Параметры  $A_{C,V}$  и  $W_{C,V}$  связаны соотношением  $A_{C,V} W_{C,V}^{3/2} = 6$  [17]. В дальнейшем положим для простоты  $A_C = A_V = A$ ,  $W_C = W_V = W$ . Тогда для функции сдвига получим

$$\Lambda(\Omega) = f_-(\Omega) - f_+(\Omega), \quad (6)$$

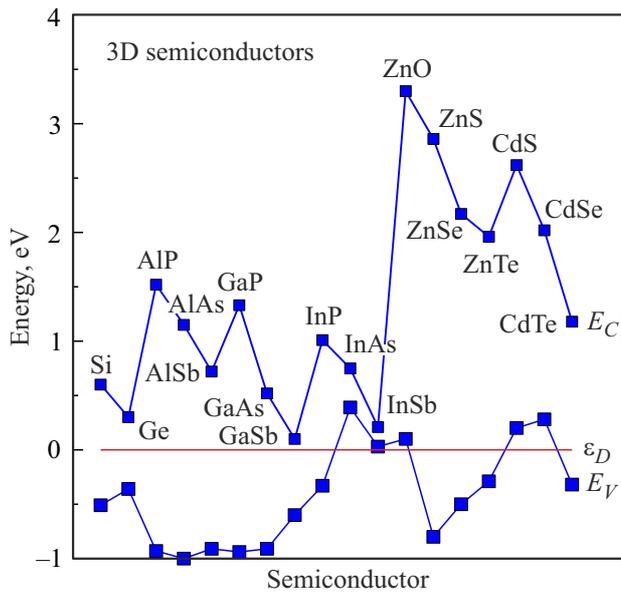
где

$$f_{\pm}(\Omega) = 2AV^2 r_{\pm}(\Omega) \arctan(\sqrt{W}/r_{\pm}(\Omega)),$$

$$r_{\pm}(\Omega) = \sqrt{\pm\Omega + E_g/2}$$

и  $V$  — матричный элемент взаимодействия обкладки с графеном. Таким образом,

$$\Lambda_{\max} \equiv |\Lambda(\pm E_g/2)| = 2AV^2 \sqrt{E_g} \arctan \sqrt{W/E_g}. \quad (7)$$



**Рис. 1.** Объемные полупроводники: значения энергий краев зон  $E_V$  и  $E_C$  для Si, Ge и бинарных соединений III–V и II–I. Прямая линия отвечает энергии точки Дирака графена  $\epsilon_D = 0$ .

Вид функции  $\Lambda(\Omega)$  представлен на рис. 1 работы [17]. В дальнейшем будем считать, что  $E_g/2W \ll 1$ , и положим

$$\sqrt{v} = A\pi V^2 = 6\pi V^2/W^{3/2},$$

так что

$$f_{\pm}(\pm E_g/2) = \sqrt{vE_g},$$

$f_{\mp}(\mp E_g/2) = 0$  и  $\Lambda(\mp E_g/2) = \pm\sqrt{vE_g}$ . Легко показать также, что  $df_{\pm}/d\Omega = \pm f_{\pm}(\Omega)/2r_{\pm}(\Omega)$  и

$$\lim_{\Omega \rightarrow \Omega_{V,C}} [d\Lambda(\Omega)/d\Omega] = -\sqrt{v} \lim_{\Omega \rightarrow \Omega_{V,C}} \left( \frac{1}{r_{-}(\Omega)} + \frac{1}{r_{+}(\Omega)} \right), \quad (8)$$

где  $\Omega_{V,C} = E_{V,C} - \omega_0$ . Эта величина имеет расходимости при  $|\Omega| \rightarrow E_g/2$ .

Для одинаковых обкладок (симметричный случай) результирующая запрещенная зона есть  $(E_V, E_C)$  и  $\Lambda(\mu) = 2\Lambda(\mu)$ . Для обкладок, выполненных из разных материалов (асимметричный случай), могут реализовываться ситуации, когда результирующая запрещенная зона равна  $(E_{V1(2)}, E_{C1(2)})$  при  $E_{g1} < E_{g2}$  ( $E_{g2} < E_{g1}$ ), и ситуации, когда эти зоны принимают значения  $(E_{V1}, E_{C2})$  или  $(E_{V2}, E_{C1})$ . При этом  $\Lambda(\mu) = \Lambda_1(\mu) + \Lambda_2(\mu)$ . В табл. 1 представлены энергетические параметры объемных полупроводников, а на рис. 1 приведены величины  $E_V$  и  $E_C$ . В расчете использованы данные табл. 4.1 работы [18], энергия точки Дирака относительно вакуума приравнивалась к работе выхода графена, равной 4.5 эВ [19]. Из рис. 1 следует, во-первых, что для большинства полупроводников  $E_C > \epsilon_D > E_V$  и только для InAs, InSb, ZnO, CdS и CdSe запрещенные зоны находятся выше  $\epsilon_D$ . Во-вторых, для всех соединений  $E_V > -1$  эВ, т.е. края

валентных зон отстоят на  $\sim 2$  эВ от нижней особенности Ван Хофа, энергия которой равна  $-1t \sim -3$  эВ [20], где  $t$  — энергия перехода электрона между ближайшими соседями в графене. Для всех рассмотренных полупроводников (кроме ZnO и, возможно, ZnS и CdS) края зоны проводимости  $E_C$  лежат ниже верхней особенности Ван Хофа  $t$ . (Строго говоря, низкоэнергетическое приближение, использованное в [13,14], работает при энергиях, значительно меньших  $t$ ). В-третьих, значения зонных параметров изменяются в широких пределах (в эВ): от 0.18 (InSb) до 3.66 (ZnS),  $E_C$  от 0.10 (GaSb) до 2.86 (ZnS),  $E_V$  от  $-1$  (AlAs) до 0.39 (InAs). Такие большие вариации параметров позволяют в принципе целенаправленно подбирать капсулирующие материалы. Отметим, что в случае собственного графена в пределе слабой связи с обкладками, наилучшими материалами для изготовления последних являются полупроводники со значениями  $E_V$  или  $E_C$ , максимально близкими к точке Дирака.

Рассмотрим функции  $\sigma^*(\mu)$ ,

$$L(\mu) = d \ln \sigma^*/d\mu \propto -S^* = -S/(\pi^2 k_B^2 T/3e)$$

и

$$PF^*(\mu) = (\sigma^*)^{-1} (d\sigma^*/d\mu)^2$$

при  $|\Omega| \rightarrow E_g/2$  в режиме слабой связи обкладок с графеном  $V^2 \ll (E_g/2)^2 \ll \xi^2$ . Отметим, что именно такой режим (который может быть обеспечен технологически) позволяет сохранить уникальность свойств графена, так как в пределе сильной связи углеродный монослой можно рассматривать как набор невзаимодействующих между собой адатомов. Легко показать, что качественный характер зависимостей  $\sigma^*(\mu)$ ,  $L(\mu)$  и  $PF^*(\mu)$  тот же,

**Таблица 1.** 3D полупроводники: ширина запрещенной зоны  $E_g$ , электронное сродство  $\chi$  и положение центра запрещенной зоны относительно энергии точки Дирака графена  $\omega_0$  в эВ

Кристалл	$E_g$	$\chi$	$\omega_0$
Si	1.11	3.99	-0.05
Ge	0.66	4.14	0.03
AlP	2.45	3.57	-0.30
AlAs	2.15	3.50	-0.08
AlSb	1.63	3.59	0.10
GaP	2.27	3.56	-0.20
GaAs	1.43	3.59	0.20
GaSb	0.70	3.90	0.25
InP	1.34	4.17	-0.34
InAs	0.36	4.89	-0.57
InSb	0.18	4.53	-0.12
ZnO	3.20	4.60	-1.70
ZnS	3.66	3.70	-1.03
ZnSe	2.67	4.00	-0.84
ZnTe	2.25	3.35	0.03
CdS	2.42	4.70	-1.41
CdSe	1.74	4.78	-1.15
CdTe	1.50	4.18	-0.43

что на рис. 1 работы [14], но проводимость при всех энергиях остается конечной. Более того, этот характер для химического потенциала, находящегося вблизи точки Дирака графена, является универсальным.

Воспользовавшись формулой (4) из работы [14] и результатами (6)–(8), для симметричного случая при  $\mu \rightarrow E_{V,C} - \omega_0$  получаем

$$\sigma_{V,C}^* \propto \sqrt{vE_g}/\gamma, \quad |L_{V,C}| \propto 1 / \sqrt{E_g(\Omega_{V,C} - \mu)},$$

$$PF_{V,C}^* \propto \sqrt{vE_g} / \gamma(\Omega_{V,C} - \mu). \quad (9)$$

Таким образом, значения  $\sigma_{V,C}^*$  прямо пропорциональны  $\sqrt{E_g}$ , тогда как величины  $|L_{V,C}| \propto |S_{V,C}^*|$  и  $PF_{V,C}^*$  обратно пропорциональны  $\sqrt{E_g}$ . Следовательно, для получения максимальных значений коэффициента Зеебека  $S$  и фактора термоэлектрической мощности  $PF$  нужно для обкладок использовать узкозонные полупроводники, тогда как в случае проводимости интерес представляют широкозонные полупроводники. Поэтому рекомендуется выбирать промежуточные (moderate) значения  $E_g$  [4]. Отметим также работы [7,21,22], в которых демонстрируется, что максимальное значение  $ZT$  достигается в узкозонных объемных материалах.

Выражения (9) можно получить и для асимметричных структур, заменив  $E_{V,C}$  и  $E_g$  на  $E_{V,C}^*$  и  $E_g^* = E_C^* - E_V^*$  (см. подробнее [14]). Ясно, что соответствующий подбор обкладок позволяет целенаправленно варьировать положение уровня  $\mu$ , при котором достигаются максимальные значения  $TE$  характеристик SLG.

### 3.2. Металлические обкладки

Рассмотрим в качестве капсулирующих обкладок объемные переходные металлы (3DM), воспользовавшись результатами работы [23]. Для немагнитных  $d$ -металлов запишем DOS в виде

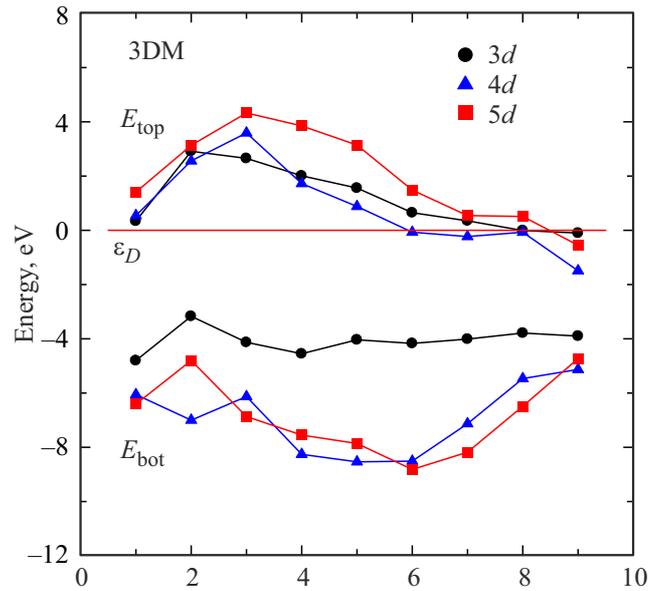
$$\rho_M(\omega) = \rho_s(\omega) + \rho_d(\omega),$$

$$\rho_{s(d)}(\omega) = \begin{cases} N_{s(d)}/W_{s(d)}, & |\Omega_{s(d)}| \leq W_{s(d)}/2, \\ 0, & |\Omega_{s(d)}| > W_{s(d)}/2, \end{cases} \quad (10)$$

где  $\rho_{s(d)}(\omega)$  — плотность состояний  $s(d)$ -зоны шириной  $W_{s(d)}$ ,  $\Omega_{s(d)} = \omega - \omega_{s(d)}$ ,  $\omega_{s(d)}$  — энергия центра  $s(d)$ -зоны,  $N_s = 2$ ,  $N_d = 10$  (модель Фриделя [24,25]). Так как  $W_s \gg W_d$  (см. [25] и приближение бесконечно широкой  $s$ -зоны в модели Андерсона [26]), пренебрежем сдвигом электронных состояний графена, наведенным  $s$ -зоной, а уширение этих состояний представим как  $\gamma_s = 2\pi V_s^2/W_s$ , где  $V_s$  — матричный элемент взаимодействия  $s$ -электронов с электронами графена. Сдвиг состояний графена, вызванный  $d$ -зоной, равен

$$\Lambda_d(\omega) = \frac{\gamma_d}{\pi} \ln \left| \frac{W_d/2 + \Omega_d}{W_d/2 - \Omega_d} \right|, \quad (11)$$

где уширение  $\gamma_d = 10\pi V_d^2/W_d$ , а  $V_d$  — матричный элемент взаимодействия  $d$ -электронов с электронами



**Рис. 2.** Объемные  $d$ -металлы: энергии верхнего  $E_{top}$  и нижнего  $E_{bot}$  краев  $d$ -зоны. 3d-металлы: 1 — Sc, 2 — Ti, 3 — V, 4 — Cr, 5 — Mn, 6 — Fe, 7 — Co, 8 — Ni, 9 — Cu; 4d-металлы: 1 — Y, 2 — Zr, 3 — Nb, 4 — Mo, 5 — Tc, 6 — Ru, 7 — Rh, 8 — Pd, 9 — Ag; 5d-металлы: 1 — Lu, 2 — Hf, 3 — Ta, 4 — W, 5 — Re, 6 — Os, 7 — Ir, 8 — Pt, 9 — Au. Прямая линия отвечает энергии точки Дирака графена  $\varepsilon_D = 0$ .

графена. Соотношение параметров  $\gamma_d$  и  $\gamma_s$  обсуждалось в [27]. В дальнейшем считаем, что  $\gamma_d \gg \gamma_s \gg \gamma$ . Для симметричной капсулированной структуры суммарное уширение в области  $s$ -зоны равно  $\Gamma_s = 2\gamma_s + \gamma$ , в области  $d$ -зоны —  $\Gamma_d = 2\gamma_d + 2\gamma_s + \gamma$ . Напомним, что уширение уровней связано с их временным затуханием:  $\tau_{s,d} \sim \hbar/\Gamma_{s,d}$ . Из (11) следует, что  $d\Lambda(\omega)/d\omega = (\gamma_d W_d/\pi)/[(W_d/2)^2 - \Omega_d^2]$ . Воспользовавшись формулой (4) из работы [14] для случая, когда уровень  $|\mu_d| \equiv |\mu - \omega_d| \rightarrow W_d/2$  и лежит вне  $d$ -зоны, получаем

$$\sigma^* \propto (\gamma_d/\gamma_s) \ln(W_d/|\mu_d - W_d/2|).$$

$$|L| \propto W_d/|\mu_d - W_d/2| \ln(W_d/|\mu_d - W_d/2|),$$

$$PF^* \propto (\gamma_d/\gamma_s) [W_d^2/(\mu_d - W_d/2)^2] \ln(W_d/|\mu_d - W_d/2|). \quad (12)$$

Если  $|\mu_d|$  расположен в  $d$ -зоне, то множитель  $\gamma_d/\gamma_s \gg 1$  нужно заменить на 1. Отсюда следует, что если  $\mu_d \equiv \mu - \omega_d \rightarrow W_d/2$ , то все рассмотренные термоэлектрические характеристики обращаются в бесконечность.

Энергетические характеристики 3DM, включая энергии середин  $d$ -зон  $\omega_d$ , полученные из данных [24,25,28], представлены в табл. 2, а на рис. 2 изображены верхние  $E_{top}$  и нижние  $E_{bot}$  границы этих зон. Из рис. 2 следует, что (при условии малого допирования графена в режиме слабой связи с обкладками) максимальные значения  $TE$  характеристик могут быть достигнуты для обкладок, выполненных из Sc, Y, Lu и последних элементов  $d$ -рядов.

**Таблица 2.** 3D переходные металлы: работа выхода  $\phi_M$ , ширина  $d$ -зоны и положение центра зоны относительно точки Дирака графена  $\omega_d$  в эВ

	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
3d	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
4d	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag
5d	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au
$\phi_M$	3.50	4.10	4.11	4.38	3.35	3.70	4.16	4.60	4.00
	3.10	3.84	4.00	4.29	4.70	4.71	4.65	4.73	4.00
	3.30	3.53	4.20	4.50	4.95	4.95	5.27	5.32	4.45
$W_d$	5.13	6.08	6.77	6.56	5.60	4.82	4.35	3.78	2.80
	6.59	8.37	9.72	9.98	9.42	8.44	6.89	5.40	3.63
	7.81	9.56	11.12	11.44	11.02	10.31	8.71	7.00	5.28
$-\omega_d$	2.23	0.13	-0.74	-1.93	-1.24	-1.76	-1.83	-1.90	-1.50
	2.76	0.41	-1.27	-3.27	-3.83	-4.29	-3.68	-2.77	-3.31
	2.50	2.22	0.49	1.85	2.36	3.67	3.82	2.99	2.09

В связи с этим отметим, что медь и золото широко используются для изготовления контактных площадок в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах [29].

Вопрос о капсулированном 3d обкладками биграфене (BLG) рассмотрен в *Приложении*.

## 4. 2D обкладки

### 4.1. Полупроводниковые обкладки

DOS графеноподобных (GLC) бинарных полупроводниковых структур  $A_N B_{8-N}$  может быть представлена в виде

$$\rho_{AB}(\bar{\Omega}) = \begin{cases} \frac{2|\bar{\Omega}|}{\xi^2}, & \sqrt{\bar{\xi}^2 + \Delta^2} \geq |\bar{\Omega}| \geq |\Delta|, \\ 0, & |\bar{\Omega}| < |\Delta|, \quad |\bar{\Omega}| > \sqrt{\bar{\xi}^2 + \Delta^2}. \end{cases} \quad (13)$$

Здесь  $\bar{\Omega} = \omega - \bar{\epsilon}$ , где  $\bar{\epsilon} = (\epsilon_a + \epsilon_b)/2$  есть середина щели шириной  $2\Delta = \epsilon_a - \epsilon_b$ ,  $\epsilon_{a(b)}$  — энергия  $p$ -орбитали атома А(В),  $\bar{\xi} = \sqrt{2\pi\sqrt{3}t}$ ,  $t$  — энергия перехода между  $p_z$ -орбиталями ближайших атомов А и В [30]. Соответствующая функция уширения есть  $\Gamma(\bar{\Omega}) = \pi\bar{V}^2\rho_{AB}(\bar{\Omega})$ , а функция сдвига равна

$$\Lambda(\bar{\Omega}) = \frac{2\bar{V}^2}{\xi^2} \bar{\Omega} \ln \left| \frac{\bar{\Omega}^2 - \Delta^2}{\bar{\Omega}^2 - \Delta^2 - \xi^2} \right|, \quad (14)$$

где  $\bar{V}$  — матричный элемент взаимодействия GLC — графен. Как показано в [14], максимальные значения статической проводимости и термоэлектрических характеристик достигаются при условии  $\bar{\mu}^2 \equiv (\mu - \bar{\epsilon})^2 \rightarrow \Delta^2$ . Для симметричных структур при этом получаем

$$\sigma_{\pm\Delta}^* \propto \bar{\Lambda}_\Delta/\gamma, \quad |L_{\pm\Delta}| \propto C_\Delta/\bar{\Lambda}_\Delta, \quad PF_{\pm\Delta}^* \propto C_\Delta^2/\gamma\bar{\Lambda}_\Delta, \quad (15)$$

где

$$\bar{\Lambda}_\Delta \approx (4\bar{V}^2\Delta/\xi^2) \ln[\bar{\xi}^2/(\Delta^2 - \bar{\mu}^2)],$$

$$C_\Delta \approx 4\bar{V}^2\Delta^2/\xi^2(\Delta^2 - \bar{\mu}^2),$$

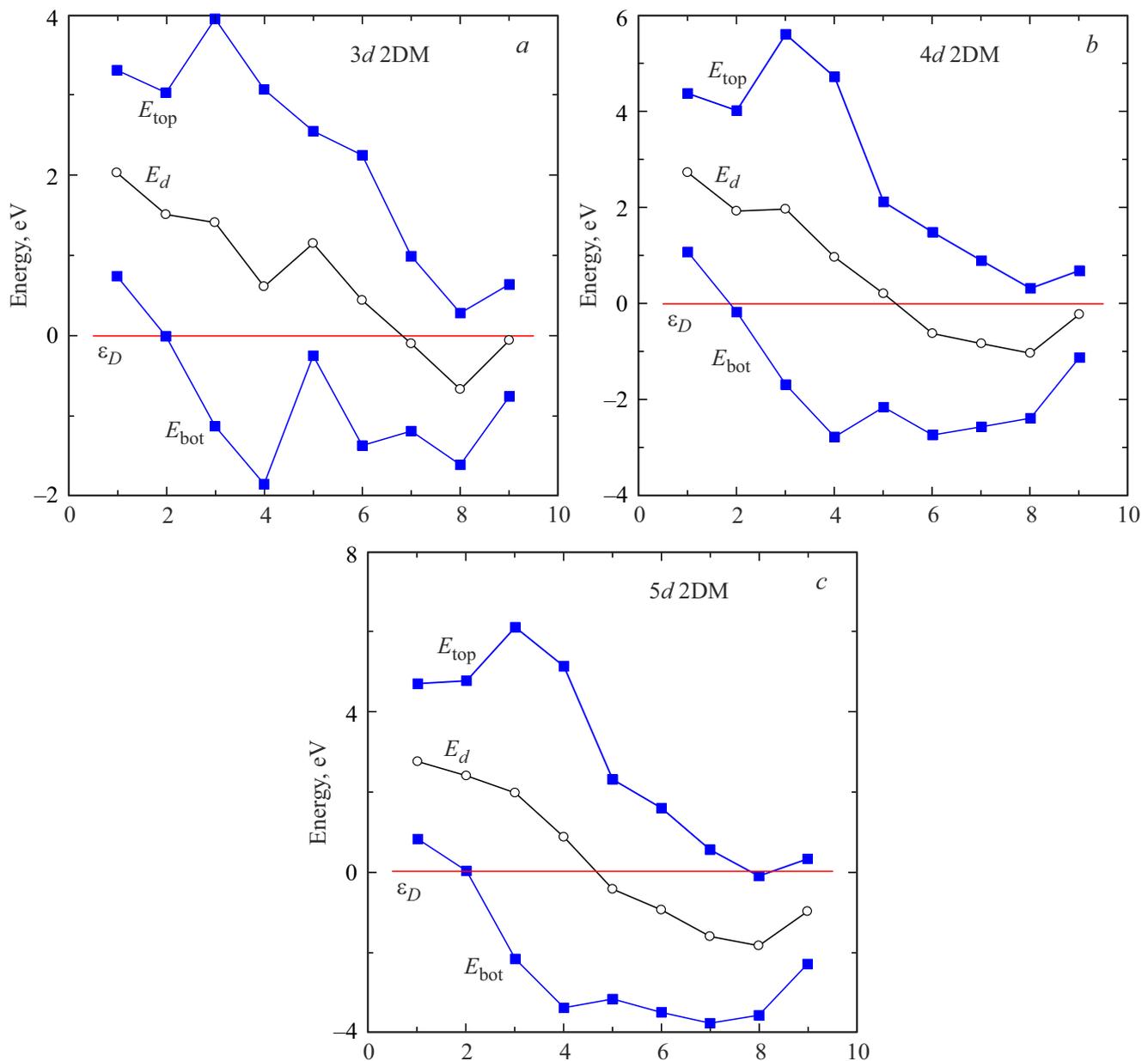
где предполагается, что химический потенциал находится внутри щели GLC. Отметим, что в работе [14] анализируются общие зависимости  $\sigma^*(\mu)$ ,  $L(\mu)$  и  $PF^*(\mu)$  и подробно рассматривается модельная симметричная структура  $h$ -BN/Gr/ $h$ -BN, для которой  $\bar{\epsilon} = 0$ , так как работы выхода Gr и  $h$ -BN совпадают. Обращаясь к другим 2D  $A_N B_{8-N}$  соединениям, отметим прежде всего наиболее изученные двумерные карбид кремния и нитриды алюминия и галлия, информация о которых содержится соответственно в работах [31,32]. В этих работах приводятся данные по ширине щелей (запрещенных зон), но, к сожалению, отсутствует информация об электронном средстве, что не позволяет оценить значения  $\bar{\epsilon}$ . Поэтому здесь мы рассмотрим 2D дихалькагениды переходных металлов (TMD), исследованные значительно тщательнее, чем 2D  $A_N B_{8-N}$  (см., например, обзоры [33,34]). В табл. 3 представлены данные, полученные путем численных расчетов из первых принципов [35]. Максимальные эффекты возрастания термоэлектрических характеристик для недопированного SLG, слабо связанного с обкладками, будут наблюдаться для  $MoS_2$  при приближении химического потенциала к дну зоны проводимости и для  $MoTe_2$  и  $WTe_2$  — к потолкам валентных зон.

Исходя из полученных в приближении сильной связи [36–38] и  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -методом [39] результатов, для грубых оценок представим DOS TMD как  $\rho(\bar{\Omega}) = \bar{\rho} = \text{const}$  при  $|\bar{\Omega}| \geq E_g/2$  и  $\rho(\bar{\Omega}) = 0$  при  $|\bar{\Omega}| < E_g/2$  (модель Халдейна–Андерсона [40]). Тогда функция сдвига

$$\Lambda(\bar{\Omega}) = \bar{\rho}\bar{V}^2 \ln |(\bar{\Omega} - E_g/2)/(\bar{\Omega} + E_g/2)|$$

и

$$d\Lambda(\bar{\Omega})/d\bar{\Omega} = \bar{\rho}\bar{V}^2 E_g / [\bar{\Omega}^2 - (E_g/2)^2].$$



**Рис. 3.** Двумерные *d*-металлы: энергии середины  $E_d$  (светлые кружки), верхнего  $E_{top}$  и нижнего  $E_{bot}$  краев (темные квадраты) *d*-зоны. *a* — 3*d*-металлы: 1 — Sc, 2 — Ti, 3 — V, 4 — Cr, 5 — Mn, 6 — Fe, 7 — Co, 8 — Ni, 9 — Cu; *b* — 4*d*-металлы: 1 — Y, 2 — Zr, 3 — Nb, 4 — Mo, 5 — Tc, 6 — Ru, 7 — Rh, 8 — Pd, 9 — Ag; *c* — 5*d*-металлы: 1 — Lu, 2 — Hf, 3 — Ta, 4 — W, 5 — Re, 6 — Os, 7 — Ir, 8 — Pt, 9 — Au. Прямая линия отвечает энергии точки Дирака графена  $\epsilon_D = 0$ .

**Таблица 3.** Полупроводниковые 2D дихалькагениды переходных металлов: ширина запрещенной зоны  $E_g$ , электронное сродство  $\chi$  и положение центра запрещенной зоны  $\bar{\epsilon}$  и ее краев  $\bar{E}_C$  и  $\bar{E}_V$  относительно энергии точки Дирака графена в эВ

TMD	$E_g$	$\chi$	$\bar{\epsilon}$	$\bar{E}_C$	$\bar{E}_V$
MoS <sub>2</sub>	1.59	4.28	-0.58	0.22	-1.37
MoSe <sub>2</sub>	1.33	3.91	-0.08	0.59	-0.74
MoTe <sub>2</sub>	0.94	3.81	0.22	0.69	-0.25
WS <sub>2</sub>	1.55	3.93	-0.21	0.57	-1.08
WSe <sub>2</sub>	1.25	3.61	0.26	0.89	-0.36
WTe <sub>2</sub>	0.74	3.67	0.46	0.83	0.09

Если в симметричной структуре  $\bar{\mu}^2 \equiv (\mu - \bar{\epsilon})^2 \rightarrow (E_g/2)^2$  и  $\mu$  остается в запрещенной зоне TMD, получаем

$$\sigma^* \propto \bar{\rho} \bar{V}^2 \ln[E_g / (E_g/2 - |\bar{\mu}|)] / \gamma,$$

$$|L| \propto E_g / [(E_g/2)^2 - \bar{\mu}^2] \ln[E_g / (E_g/2 - |\bar{\mu}|)],$$

$$PF^* \propto \bar{\rho} \bar{V}^2 E_g^2 / \gamma [(E_g/2)^2 - \bar{\mu}^2]^2 \ln[E_g / (E_g/2 - |\bar{\mu}|)]. \tag{16}$$

Если же  $\mu$  лежит вне запрещенной зоны TMD, то в выражениях (16) нужно изменить знак разностей  $(E_g/2 - |\bar{\mu}|)$  и  $[(E_g/2)^2 - \bar{\mu}^2]$ , а  $\gamma$  заменить на  $\gamma + 2\bar{\Gamma}$

(где  $\bar{\Gamma} = \pi\rho\bar{V}^2$  — уширение уровней графена за счет взаимодействия с обкладкой TDM) и  $\bar{\Gamma} \gg \gamma$ . Таким образом, наиболее перспективным материалом обкладок (из рассмотренного ряда TDM) представляется MoS<sub>2</sub>.

## 4.2. Металлические обкладки

Интенсивный поиск новых материалов, начавшийся сразу же после возникновения графеновой тематики, привел к появлению статей по 2D металлам (2DM) [41–44], в которых для расчетов использовались различные варианты DFT (density functional theory). К сожалению, в работах [41–44] нет данных ни по ширинам  $d$ -зон  $W_d$ , ни по работам выхода переходных металлов. Продемонстрировано, однако, что постоянные решетки 2DM почти идентичны постоянным решеткам 3DM. Отсюда следует, что близки и значения энергий перехода  $t_{3DM}$  и  $t_{2DM}$ . Так как в приближении сильной связи  $W_d \propto z$ , где  $z$  — число ближайших соседей, можем записать  $W_d(2DM) \approx \eta W_d(3DM)$ , где  $\eta = z_{2DM}/z_{3DM} < 1$ . Именно это обстоятельство было использовано в [45] для модельного описания зонных характеристик переходных 2DM. Что касается работ выхода 2DM, то в работе [45] они приравнивались к работам выхода 3DM. Здесь уместно подчеркнуть, что, по данным справочника [28], даже для хорошо изученных тугоплавких металлов разброс значений  $\phi_M$  весьма значителен. Полученные таким образом значения середин  $E_d$  и краев  $E_{top}$  и  $E_{bot}$   $d$ -зон 2DM представлены на рис. 3. Для недопированного графена в режиме слабой связан с обкладками, наиболее перспективными материалами для термоэлектрических применений являются конечные элементы  $d$ -рядов, края  $d$ -зон которых близки к точке Дирака, и начальные элементы, для которых дно  $d$ -зоны расположено вблизи  $\varepsilon_D$ .

Для описания DOS 2DM естественно использовать ту же модель Фриделя, что и для 3DM в п.3.2. Поэтому экстремальные значения функций  $\sigma^*$ ,  $|L|$  и  $PF^*$  описываются выражениями (12). При этом следует учесть, что  $W_d(2DM) < W_d(3DM)$ , тогда как отношения  $(\gamma_d/\gamma_s)$  для 3DM и 2DM, по нашим оценкам, приблизительно равны.

Вопрос о капсулированном 2D обкладками BLG рассмотрен в *Приложении*.

## 5. Заключение

В настоящей работе исследованы зависимость статической проводимости  $\sigma$ , коэффициент Зеебека  $S$  и фактора термоэлектрической мощности  $PF = \sigma S^2$  графена от природы и размерности обкладок капсулированной структуры и положения химического потенциала  $\mu$ . В качестве материалов обкладок рассмотрены 3D и 2D полупроводники ( $A_N V_{8-N}$  и TMD) и переходные металлы. Графен рассматривался в низкоэнергетическом при-

ближении, для описания плотностей состояний обкладок использовались простые модели.

Для 3D полупроводниковых обкладок показано, что максимальные значения  $S$  и  $\sigma S^2$  достигаются в случае, когда  $\mu$ , находясь в области перекрытия запрещенных зон обкладок 1 и 2, т.е. в интервале  $E_g^* = E_C^* - E_V^*$ , стремится  $E_V^*$  или  $E_C^*$ . При этом  $\sigma$  принимает максимальное конечное значение, пропорциональное  $(E_g^*)^{1/2}$ , тогда как  $|S|$ ,  $PF \rightarrow \infty$  как  $(E_g^* \delta_{V,C})^{-1/2}$  и  $(E_g^* \delta_{V,C})^{-1/2} \delta_{V,C}^{-1/2}$ , где  $\delta_{V,C} = |E_{V,C}^* - \mu|$ . Для 2D полупроводниковых TMD показано, что в симметричной структуре при нахождении химического потенциала внутри запрещенной зоны  $E_g$  имеем

$$\sigma^* \propto \ln(E_g/\bar{\delta}), \quad |L| \propto (E_g/w) \ln^{-1}(E_g/\bar{\delta})$$

и

$$PF^* \propto (E_g/w)^2 \ln^{-1}(E_g/\bar{\delta}),$$

где  $\bar{\delta} = E_g/2 - |\mu|$  и  $w = (E_g/2)^2 - \mu^2$ . Так как логарифм — слабо меняющаяся функция, очевидно сходство результатов для 3D и 2D обкладок. Интересно отметить, что, поместив капсулированный 2D полупроводниковыми обкладками графен в вертикальное электростатическое поле, можно менять ширину результирующей запрещенной зоны. Для симметричной структуры, например, имеем сужение  $E_g$  вида  $E_g' = E_g - eFl$ , где  $F$  — напряженность поля,  $l$  — расстояние между 2D обкладками. В случае асимметричной структуры значение можно как уменьшить, так и увеличить. При этом точка Дирака испытывает сдвиг  $\Delta\varepsilon_D = eFl/2$ . Таким путем можно смещать положения экстремумов  $\sigma$ ,  $S$  и  $PF$ .

Для объемных и двумерных обкладок, выполненных из  $d$ -металлов, максимальные значения рассматриваемых характеристик достигаются для химического потенциала, находящегося вблизи границ  $d$ -зоны. В этом случае имеем

$$\sigma^* \propto \ln(W_d/\delta_d), \quad |L| \propto (W_d/\delta_d) \ln^{-1}(W_d/\delta_d)$$

и

$$PF^* \propto (W_d/\delta_d)^2 \ln^{-1}(W_d/\delta_d),$$

где  $\delta_d = |\mu_d - W_d/2|$ . Таким образом, разница 3D и 2D обкладок сводится к различиям ширины  $d$ -зон:  $W_d(2DM) < W_d(3DM)$ . Следует подчеркнуть, что рассмотренные нами расходимости функций  $\sigma(\mu)$ ,  $S(\mu)$  и  $PF(\mu)$  связаны не с топологическими особенностями капсулированных структур, а с грубостью принятых для обкладок моделей DOS. При использовании более сложных моделей расходимости превращаются в экстремумы конечной высоты. Тот же эффект будет иметь учет не только наведенного обкладками сдвига электронных состояний графена, что рассмотрено в настоящей работе, но и их уширения. Подчеркнем также, что полученные здесь для SLG результаты справедливы также для бесщелевых силицена, германена и станена и, при определенных условиях, для BLG (см. *Приложение*).

Наличие подложки (равно как и обкладок) может вызвать появление сравнительно узких щелей (порядка десятых долей эВ) в электронном спектре графена в окрестности точки Дирака [46,47]. В работе [48] показано, что при перекрытии химического потенциала с границами наведенной обкладками щели будут наблюдаться экстремумы ТЕ характеристик.

В заключение отметим, что в теоретической литературе (см., например, [48,49] и ссылки, приведенные там) нередко отмечаются недостатки формулы Мотта. Тем не менее практически все экспериментальные результаты обсуждаются на базе именно этой формулы. Более того, в расчетах [1–13] также используется формула Мотта, в том числе и для исследования температурных зависимостей ТЕ. Так как для проводимости графена мы в настоящей работе используем модель Друде (исключающую электрон-электронные и электрон-фононные взаимодействия) и стремимся только к качественным (в лучшем случае, полуколичественным) результатам, то полагаем, что использование формулы Мотта при описании достаточно сложной структуры капсулированного графена вполне оправдано.

## Приложение

Здесь мы рассмотрим термоэлектрические свойства капсулированного биграфена, или BLG. Электронный спектр свободного BLG имеет вид [50,51]

$$\varepsilon_{\pm}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t_{\perp}/2 \pm \sqrt{(t_{\perp}/2)^2 + t^2 f^2(\mathbf{k})}, \quad (\text{П.1})$$

где

$$f(\mathbf{k}) = \sqrt{3 + 2 \cos(k_y a \sqrt{3}) + 4 \cos(k_y a \sqrt{3}/2) \cos(3k_x a/2)},$$

$t$  и  $t_{\perp}$  — энергии перескока электрона между ближайшими атомами углерода в монослое (находящимися на расстоянии  $a$  друг от друга) и ближайшими атомами в верхнем и нижнем слоях BLG соответственно ( $t_{\perp}/t \sim 0.1$ )  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  — волновой вектор электрона в монослое, лежащий в плоскости  $(x, y)$ , энергия точки Дирака  $\varepsilon_D$  принята за нуль, нижние индексы соответствуют знакам перед первым слагаемым в правой части выражения (П.1), верхние — знакам перед радикалом. Легко видеть, что выражение  $\varepsilon_{\pm}^{\pm}(\mathbf{k}) \mp t_{\perp}/2$  для четырех зон BLG с точностью до обозначений совпадает с законом дисперсии для двух зон свободного GLC вида  $E_{\pm}(\mathbf{k}) - \varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + t^2 f^2(\mathbf{k})}$ , где  $\varepsilon = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$ ,  $\Delta = (\varepsilon_a - \varepsilon_b)/2$  и  $\varepsilon_{a(b)}$  — энергии  $p$ -орбиталей атомов А(В) [52]. В низкоэнергетическом приближении соответствующая DOS равна

$$\rho_{\pm}^{\pm}(\Omega_{\pm}) = \begin{cases} \frac{2|\Omega_{\pm}|}{\xi^2}, & R \geq |\Omega_{\pm}| \geq t_{\perp}/2, \\ 0, & |\Omega_{\pm}| > t_{\perp}/2, |\Omega_{\pm}| > R, \end{cases} \quad (\text{П.2})$$

где  $R = \sqrt{\xi^2 + t_{\perp}^2}/4$ . Так как  $t \sim 3$  эВ,  $t_{\perp} \sim 0.4$  эВ, то при  $|\omega| \gg t_{\perp}/2$  DOS BLG (П.2) переходит в удвоенное DOS

SLG, где  $\rho_{\text{SLG}}(\omega) = 2|\omega|/\xi^2$  при  $|\omega| \leq \xi$  и  $\rho_{\text{SLG}}(\omega) > 0$  при  $|\omega| > \xi$ . Отсюда следует, что при  $|E_V^*|, |E_C^*| \gg t_{\perp}/2$  и  $\mu \rightarrow E_V^*, E_C^*$  все выводы п. 3.1, сделанные для SLG с  $3d$  обкладками, справедливы и для BLG. Аналогично при  $|\Delta| \gg t_{\perp}/2$  и  $\bar{\mu} \rightarrow \Delta$  выводы п. 3.2 для SLG с  $2d$  обкладками отвечают и настоящему случаю. Далее, так как  $W_d \gg t_{\perp}$  (как для  $3d$ , так и для  $2d$ ), то при  $|\mu_d| \rightarrow W_d/2$  все выводы п. 3.2 и 4.2 могут быть отнесены и к BLG. Таким образом, если особенности DOS обкладок имеют место при энергиях, значения которых намного больше  $t_{\perp}/2$ , выражения (9), (12), (15) и (16) справедливы и для BLG. В случаях, когда особенности DOS капсулирующих слоев имеют энергии порядка  $t_{\perp}/2$ , необходимо вычислить статическую проводимость (например, по схеме работ [13,14]), а затем коэффициент Зеебека и фактор термоэлектрической мощности BLG.

Капсулированный BLG (как и капсулированный SLG) может рассматриваться как элемент сверхрешетки, где слои BLG (SLG) чередуются с обкладками. В связи с этим отметим, что интерес к BLG как элементу сверхрешеток имеет десятилетнюю историю [53–59]. При этом логично использовать схему работы [60], близкую к использованной в настоящей работе схеме.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] A.M. Dehkordi, M. Zabarjad, J. He, T.M. Tritt. Mater. Sci. Engin. R: Reports, **97**, 1 (2015).
- [2] Y. Xia, J. Park, F. Zhou, V. Ozolins. Phys. Rev. Appl., **11**, 024017 (2019).
- [3] E.B. Isaacs, C. Wolverton. Phys. Rev. Mater., **3**, 015403 (2019).
- [4] S. Wei, C. Wang, S. Fan, G. Gao. J. Appl. Phys., **127**, 155103 (2020).
- [5] D. Li, Y. Gong, Y. Chen, J. Lin, Q. Khan, Y. Zhang, Y. Li, H. Zhang, H. Xie. Nano-Micro Lett., **12**, 36 (2020).
- [6] H. Usui, K. Kuroki. J. Appl. Phys., **121**, 165101 (2017).
- [7] E.H. Hasdeo, L.P.A. Krisna, M.Y. Hanna, B.E. Gunara, N.T. Hung, A.R.T. Nugraha. J. Appl. Phys., **126**, 035109 (2019).
- [8] Y. Xia, J. Park, V. Ozolins, C. Wolverton. Phys. Rev. B, **100**, 201401(R) (2019).
- [9] J.M. Adhidewata, A.R.T. Nugraha, E.H. Hasdeo, P. Estell, B.E. Gunara. arXiv: 2107.06826.
- [10] A. Darmawan, E. Suprayoga, A.R.T. Nugraha, A.A. AlShaikhi. arXiv: 2107.10603.
- [11] K.L. Grosse, M.-H. Bae, F. Lian, E. Pop, W.P. King. Nature Nanotechnol., **6**, 287 (2011).
- [12] J. Duan, X. Wang, X. Lai, G. Li, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Zabarjadi, E.Y. Andrei. PNAS, **113**, 14272 (2016).
- [13] Z.Z. Alisultanov. Low Temp. Phys., **39**, 592 (2013).
- [14] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТТ, **65**, 652 (2023). [S.Yu. Davydov. Phys. Solid State, **65**, 635 (2023)].
- [15] С.Ю. Давыдов. Письма ЖТФ, **47**(13), 52 (2021). [S.Yu. Davydov. Techn. Phys. Lett., **47**, 649 (2021)].

- [16] C. Persson, U. Lidefelt. *Materials Science Forum*, **264–268**, 275 (1998).
- [17] С.Ю. Давыдов. *ЖТФ*, **84** (4), 155 (2014). [S.Yu. Davydov. *Techn. Phys.*, **59**, 624 (2014)].
- [18] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990) гл. 4.
- [19] S. Mammadov, J. Ristein, J. Krone, C. Raidel, M. Wanke, V. Wiesmann, F. Speck, T. Seyller. *2D Mater.*, **4**, 015043 (2017).
- [20] A.H. Castro Nero, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [21] J.O. Sofo, G.D. Mahan. *Phys. Rev. B*, **49**, 4565 (1994).
- [22] Z.M. Gibbs, H.S. Kim, H. Wang, G.J. Snyder. *Appl. Phys. Lett.*, **106**, 022112 (2015).
- [23] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **64** (6), 817 (2021).
- [24] В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин. *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях* (Екатеринбург, УрО РАН, 2004) гл. 2.
- [25] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) гл. 20.
- [26] Ч. Киттель. *Квантовая теория твердых тел* (М., Наука, 1967) гл. 18.
- [27] С.Ю. Давыдов, В.О. Посредник. *Письма ЖТФ*, **47** (11), 37 (2021).
- [28] В.С. Фоменко. *Эмиссионные свойства материалов* (Киев, Наук. думка, 1981).
- [29] И. В. Антонова. *ФТП*, **50**, 67 (2016). [I.V. Antonova. *Semiconductors*, **50**, 66 (2016)].
- [30] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **51**, 226 (2017). [S.Yu. Davydov. *Semiconductors*, **51**, 217 (2017)].
- [31] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **54**, 446 (2020). [S.Yu. Davydov. *Semiconductors*, **54**, 523 (2020)].
- [32] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **62**, 955 (2020). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State*, **62**, 1085 (2020)].
- [33] A. Chaves, J.G. Azadani, H. Alsalman, D.R. da Costa, R. Frisenda, A.J. Chaves, S.H. Song, Y.D. Kim, D. He, J. Zhou, A. Castellanos-Gomez, F.M. Peeters, Z. Liu, C.L. Hinkle, S.-H. Oh, P.D. Ye, S.J. Koester, Y.H. Lee, Ph. Avouris, X. Wang, T. Low. *2D Mater. Appl.*, **4**, 29 (2020).
- [34] Y. Jing, B. Liu, X. Zhu, F. Ouyang, J. Sun, Y. Zhou. *Nanophotonics*, **9**, 1675 (2020).
- [35] J. Kang, S. Tongay, J. Zhou, J. Li, J. Wu. *Appl. Phys. Lett.*, **102**, 012111 (2013).
- [36] J.Á. Silva-Guillén, P. San-Jose, R. Roldán. *Appl. Sci.*, **6**, 284 (2016).
- [37] A.C. Dias, F. Qu, D.L. Azevedo, J. Fu. *Phys. Rev. B*, **98**, 075202 (2018).
- [38] S.K. Pandey, R. Das, P. Mahadevan. *ACS Omega*, **5**, 15169 (2020).
- [39] S. Aas, C. Bulutaya. *J. Appl. Phys.*, **126**, 115701 (2019).
- [40] F.D.M. Haldane, P.W. Anderspn. *Phys. Rev. B*, **13**, 2553 (1976).
- [41] J. Nevalaita, P. Koskinen. *Phys. Rev. B*, **97**, 035411 (2018).
- [42] J. Nevalaita, P. Koskinen. *AIP Advances*, **10**, 065327 (2020).
- [43] S. Ono. *Phys. Rev. B*, **102**, 166424 (2020).
- [44] T. Wang, M. Park, Q. Yu, J. Zhang, Y. Yang. *Materials Today Advances*, **8**, 100092 (2020).
- [45] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **55**, 1433 (2013). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State*, **55**, 1536 (2013)].
- [46] S. Kim, J. Ihm, H.J. Choi, Y.-W. Son. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 176802 (2008).
- [47] T. Jayasekera, S. Xu, K.W. Kim, B. Nardell. *Phys. Rev. B*, **84**, 035442 (2011).
- [48] А.А. Варламов, А.В. Кавокин, И.А. Лукьянчук, С.Г. Шараров. *УФН*, **182**, 1229 (2012). A.A. Varlamov, A.V. Kavokin, I.A. Luk'yanchuk, S.G. Shararov. [*Phys.-Uspekhi*, **55**, 1146 (2012)].
- [49] J.M. Buhmann, M. Sigrist. *Phys. Rev. B*, **88**, 115128 (2013).
- [50] M.I. Katsnelson. *Graphene* (N.Y., Cambridge University Press, 2012).
- [51] E. McCann, M. Koshino. *Rep. Progr. Phys.*, **76**, 056503 (2013).
- [52] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **58**, 779 (2016). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State*, **58**, 804 (2016)].
- [53] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters. *Phil. Trans. R. Soc., Math. Phys. Engin. Sci.*, **368**, 5499 (2011).
- [54] M. Killi, S. Wu, A. Paramakanti. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 086801 (2011).
- [55] T.P. Kaloni, Y.C. Cheng, U. Schwingenschlögl. *J. Mater. Chem.*, **22**, 919 (2012).
- [56] F. Sattari, E. Faizabadi. *Inter. J. Mod. Phys. B*, **27**, 1350024 (2013).
- [57] C.H. Pham, T.T. Nguyen, V.L. Nguyen. *J. Appl. Phys.*, **116**, 123707 (2014).
- [58] L. Azadi, S. Shojaei. *J. Comput. Electron.*, **20**, 1248 (2021).
- [59] S.A.A. Ghorashi, A. Dunbrack, J. Sun, X. Du, J. Cano. *arXiv: 2206.13501*.
- [60] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **64**, 1828 (2022). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State*, **64**, 1792 (2022)].

Редактор Г.А. Оганесян

## Theoretical estimates of the thermoelectric power factor of graphene encapsulated between 3D and 2D semiconductor and metal slabs

S.Yu. Davydov<sup>1</sup>, O.V. Posrednik<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ioffe Institute,  
194021 St. Petersburg, Russia

<sup>2</sup> St. Petersburg Electrotechnical University (LETI),  
197022 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The conditions of extremeness of the conductivity, the Seebeck coefficient and the thermoelectric power factor values of encapsulated graphene, considered as a functions of the chemical potential, are determined. 3D and 2D semiconductors and transition metals are considered as slabs. The use of simple models allowed us to obtain analytical results. Numerical estimates were performed for bulk Si, Ge and 16 binary III–V and II–VI compounds, six two-dimensional semiconductor transition metal dichalcogenides and all elements of the 3d, 4d and 5d series. Recommendations of slab materials allowing to maximize thermoelectric characteristics are given. Encapsulated two-layer graphene is also briefly discussed.