



Кругляк Ю.А.

Кругляк Ю.А.

Факультет інформаційних технологій,
Одеський державний екологічний університет,
вул.Львівська, 15, Одеса, 65016, Україна

ЕЛЕКТРИЧНИЙ СТРУМ, ТЕРМОСТРУМ І ПОТОКИ ТЕПЛА В НАНО- І МІКРОЕЛЕКТРОНІЦІ: СПЕЦІАЛЬНІ ПИТАННЯ

Сучасна модель переносу електронів і тепла Ландауєра – Датти – Лундстрома (ЛДЛ) резюмована в [1]: якщо зонна структура задана аналітично або чисельно, можна оцінити число мод провідності. Далі слід задатися моделлю для середньої довжини вільного пробігу. У підсумку можна обчислити термоелектричні транспортні коефіцієнти для 1D, 2D і 3D провідників будь-якого масштабу в балістичному, квазібалістичному або дифузійному режимах лінійного відгуку за наявності перепаду напруги й/або температури на кінцях провідника. Далі обговорюються наступні питання в концепції ЛДЛ: біполярна провідність, теплопровідність масивних провідників, питома теплота й теплопровідність, дебаївська модель, розсіювання фононів, залежність ґраткової теплопровідності від температури, квантування теплопровідності. У додатку даються остаточні вирази для термоелектричних транспортних коефіцієнтів через інтеграли Фермі – Дірака для 1D, 2D і 3D провідників з параболічною зонною структурою й для 2D графена з лінійною дисперсією в балістичному й дифузійному режимах зі степеневим законом розсіювання.

Ключові слова: наноелектроніка, мікроелектроніка, біполярна провідність, теплопровідність, дебаївська модель, квазірівноважний транспорт, розсіювання фононів, квантування теплопровідності, термоелектричні транспортні коефіцієнти.

The modern Landauer – Datta – Lundstrom (LDL) electron and heat transport model was briefly summarized in [1], namely: if a band structure is chosen analytically or numerically, the number of conduction modes can be evaluated and, if a model for a mean-free-path for backscattering can be established, then the near-equilibrium thermoelectric transport coefficients can be calculated for 1D, 2D, and 3D resistors of any size in ballistic, quasi-ballistic, and diffusive linear response regimes when there are differences in both voltage and temperature across the device. The following topics are discussed now in the LDL approach: bipolar conductivity, thermal conductivity of the bulk conductors, specific heat versus thermal conductivity, Debye model, phonon scattering, lattice thermal conductivity versus

temperature, difference between lattice thermal and electrical conductivities, lattice thermal conductivity quantization. Appendices give final expressions of thermoelectric transport coefficients through the Fermi – Dirac integrals for 1D, 2D, and 3D resistors with parabolic band structure and for 2D graphene with linear dispersion in ballistic and diffusive regimes with the power law scattering.

Key words: nanoelectronics, microelectronics, bipolar conductivity, thermal conductivity, Debye model, near-equilibrium transport, phonon scattering, thermal conductivity quantization, thermoelectric transport coefficients.

Вступ

Сучасна модель транспорту електронів і тепла Ландауера – Датті – Лундстрома (ЛДЛ) викладена в [1]. Ця транспортна модель базується на трьох концепціях: моди провідності $M(E)$, коефіцієнти проходження $T(E)$, фермієвське вікно провідності для електронів $(-\partial f_0/\partial E)$ і відповідні вирази для фононів, пропорційні $(-\partial n_0/\partial E)$, де $f_0(E)$ й $n_0(E)$ – рівноважні значення функцій Фермі й Бозе. Ці віконні функції відповідальні за відбір тих електронних і фононних мод провідності, які і дають внесок в електричний струм і потік тепла в режимі лінійного відгуку.

Ми обговоримо наступні питання в рамках концепції ЛДЛ: біполярна провідність, теплопровідність масивних провідників, питома теплота й теплопровідність, дебаївська модель, розсіювання фононів, залежність ґраткової теплопровідності від температури, квантування теплопровідності.

У підсумку, якщо відомо або задано зонну структуру провідника, можна обчислити число мод провідності; якщо експериментально визначено або обрано модель для середнього значення довжини вільного пробігу $\lambda(E)$, можна обчислити квазірівноважні транспортні коефіцієнти, використовуючи наведені в додатках остаточні вирази для них через інтеграли Фермі – Дірака для 1D, 2D і 3D провідників з параболічною зонною структурою й для графена з лінійною дисперсією в балістичному й дифузійному режимах зі степеневим законом розсіювання.

Біполярна провідність

Розглянемо 3D напівпровідник з параболічною дисперсією. Для зони провідності число мод провідності

$$M_{3D}^{(c)}(E) = g_v \frac{m_n^*}{2\pi\hbar^2} (E - E_C), \quad (E \geq E_C), \quad (1a)$$

а для валентної зони

$$M_{3D}^{(v)}(E) = g_v \frac{m_p^*}{2\pi\hbar^2} (E_V - E) \quad (E \leq E_V). \quad (1b)$$

Питома провідність [1] забезпечується двома внесками: від зони провідності

$$\sigma_n = \frac{q^2}{h} \int_{E_C}^{\infty} M_{3D}^{(c)}(E) \lambda_n(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (2a)$$

і від валентної зони

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

Коефіцієнт Зеебека S_n для електронів у зоні провідності впливає з рівнянь (6б) в [1]:

$$\sigma_n = \int_{E_C}^{\infty} \sigma'_n(E) dE, \quad (3a)$$

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

$$s_T^{(c)} = -\frac{k}{q} \int_{E_C}^{\infty} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'_n(E) dE, \quad (3в)$$

$$S_n = s_T^{(c)} / \sigma_n. \quad (3г)$$

Аналогічно S_p для електронів у валентній зоні:

$$\sigma_p = \int_{-\infty}^{E_V} \sigma'_p(E) dE, \quad (4a)$$

$$\sigma'_p(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}^{(v)}(E_V - E) \lambda_p(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (4б)$$

$$s_T^{(v)} = -\frac{k}{q} \int_{-\infty}^{E_V} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'_p(E) dE, \quad (4в)$$

$$S_p = s_T^{(v)} / \sigma_p. \quad (4г)$$

Однак знак S_p буде додатнім.

Що відбувається, якщо внесок у провідність дають обидві зони – і провідності й валентної зони? Це трапляється для вузькозонних провідників або ж за високої температури. У цьому випадку потрібно просто інтегрувати по всіх модах:

$$\sigma^{tot} \equiv \sigma_n + \sigma_p = \frac{q^2}{h} \int_{E_1}^{E_2} M_{3D}^{tot}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (5a)$$

$$M_{3D}^{tot}(E) = M_{3D}^{(c)}(E) + M_{3D}^{(v)}(E). \quad (5b)$$

Інтегрувати по всій зоні провідності й по всій валентній зоні немає потреби, оскільки фермієвська функція забезпечує експоненційне занулення підінтегрального виразу в міру наближення до країв зон. Важливо те, що в обох випадках інтегрувати потрібно той же вираз з відповідними $M_{3D}(E)$ й $\lambda(E)$ у межах обраної різниці $E_2 - E_1$. В обох зонах струм переноситься електронами. Наш загальний вираз однаковий як для зони провідності, так і для валентної зони. має потреби змінювати знаки для валентної зони або $f_0(E)$ замінити на $1 - f_0(E)$.

Для обчислення коефіцієнта Зеєбека з урахуванням внесків від обох зон згадаємо, що в першій прямій формі транспортних коефіцієнтів (66) з [1] внески від кожної моди підсумовуються так, що питома значення коефіцієнта S_{ore}

$$S_T^{tot} = -\frac{k}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE = S_n \sigma_n + S_p \sigma_p; \quad (6a)$$

тоді коефіцієнт Зеєбека для біполярної провідності

$$S^{tot} = \frac{S_n \sigma_n + S_p \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p}. \quad (6b)$$

Оскільки коефіцієнти Зеєбека мають протилежні знаки для зони провідності й для валентної зони сумарне значення коефіцієнта Зеєбека суттєво зменшується за високих температур, а термоелектричне обладнання припиняє нормально функціонувати.

Теплопровідність масивних провідників

Теплопровідність масивного дифузійного провідника є ключовою властивістю матеріалу провідника, яка контролює функціональність будь-якого електронного обладнання. За аналогією з коефіцієнтом проходження (39) в [1] для транспорту електронів фононне проходження виражається в такий же спосіб:

$$T_{ph}(\hbar\omega) = \frac{\lambda_{ph}(\hbar\omega)}{\lambda_{ph}(\hbar\omega) + L} \Big|_{L \gg \lambda_{ph}} \rightarrow \frac{\lambda_{ph}(\hbar\omega)}{L}. \quad (7)$$

Також очевидно, що для великих 3D провідників число фононних мод пропорційне площі поперечного перерізу провідника:

$$M_{ph}(\hbar\omega) \propto A. \quad (8)$$

Повернемося до рівняння (76) в [1], розділивши й помноживши його на A/L , що дає рівняння (69) там же для потоку фононного тепла, лише постульованого в [1]:

$$\frac{Q}{A} \equiv J_{Qx}^{ph} = -\kappa_L \frac{dT}{dx} \quad (9)$$

з питомою ґратковою теплопровідністю

$$\kappa_L = K_L \frac{L}{A}, \quad (10)$$

а підставляючи (7) в (82) в [1] для питомої ґраткової теплопровідності, остаточно одержуємо:

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega). \quad (11)$$

Зручно ввести усереднене питома число фононних мод (на одиницю поперечного перерізу провідника), що беруть участь у переносі тепла:

$$\langle M_{ph} / A \rangle \equiv \int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega). \quad (12)$$

Тоді

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \langle M_{ph} / A \rangle \langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle, \quad (13)$$

де усереднена належним чином середня довжина вільного пробігу визначається як

$$\langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle = \frac{\int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}. \quad (14)$$

Таким чином, парі фононних транспортних рівнянь (9) і (13) відповідає пара електронних транспортних рівнянь:

$$J_x = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F)}{dx}, \quad (15)$$

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} \langle M_{el} / A \rangle \langle \langle \lambda_{el} \rangle \rangle. \quad (16)$$

Вирази для питомої теплопровідності (13) і для електричної провідності (16) мають таку саму структуру. Це завжди добуток відповідного кванта провідності на питома число відповідних мод провідності, що брали участь у транспорті, і на належним чином усереднену середню довжину вільного пробігу. Далі ми обговоримо ці три важливі властивості фононного транспорту.

Пропорційність питомої теплоти теплопровідності

Зв'язок між питомою ґратковою теплопровідністю й ґратковою теплоємністю за постійного об'єму добре відомий [2 – 5]. Ми покажемо, що відповідний коефіцієнт пропорційності є добутком усередненої середньої довжини вільного пробігу $\langle \langle \Lambda_{ph} \rangle \rangle$ й усередненої швидкості фононів $\langle v_{ph} \rangle$, а саме:

$$\kappa_L = \frac{1}{3} \langle \langle \Lambda_{ph} \rangle \rangle \langle v_{ph} \rangle C_V. \quad (17)$$

Повна енергія фононів в одиниці об'єму

$$E_{ph} = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) n_0(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (18)$$

де $D_{ph}(\hbar\omega)$ є густина фононних станів. За визначенням

$$\begin{aligned} C_V &\equiv \frac{\partial E_{ph}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) n_0(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \\ &= \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) \left(\frac{\partial n_0(\hbar\omega)}{\partial T} \right) d(\hbar\omega) = \frac{\pi^2 k^2 T}{3} \int_0^{\infty} D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \end{aligned} \quad (19)$$

де було використано рівняння (74) і (81) з [1]. Далі помножимо й розділимо (11) на (19) та одержимо шукану пропорційність:

$$\kappa_L = \left[\frac{\frac{1}{h} \int_0^{\infty} \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^{\infty} D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \right] C_V. \quad (20)$$

Одержимо остаточний вираз (17) і тим самим дамо коректну фізичну інтерпретацію коефіцієнта пропорційності в рівнянні (20). Для цього нам потрібно повернутися до рівняння (7). Цей вираз для коефіцієнта проходження легко вивести для 1D провідника з урахуванням лише декількох простих і прийнятних допущень. Незважаючи на здавалося б обмежену застосовність, на практиці воно відмінно працює для провідників будь-якої розмірності. Висновок рівняння (7) ґрунтується на інтерпретації середньої довжини вільного пробігу $\lambda(E)$ або $\lambda(\hbar\omega)$ як на зворотне значення ймовірності (на одиницю довжини) того, що потік часток у додатньому напрямку перетворюється в потік у протилежному напрямку. Саме з цієї причини величину λ треба б називати й часто називають середньою довжиною вільного розсіювання назад (mean-free-path for backscattering) замість звичного й не зовсім коректного – середньої довжини вільного пробігу. Узгодимо величину λ із часом розсіювання τ . Це легше всього зробити на прикладі 1D провідника. Нехай частка здійснює акт розсіювання. Для ізотропного розсіювання в 1D провіднику електрон може розсіятися вперед або назад. Тільки розсіювання назад істотніше для середнього шляху вільного пробігу настільки, що час між двома послідовними розсіюваннями назад є 2τ . Таким чином, середня довжина вільного розсіювання назад є подвоєна середня довжина розсіювання:

$$\lambda_{1D}(E) = 2\Lambda(E) = 2v(E)\tau(E). \quad (21a)$$

Показано [6], що коректне визначення середньої довжини вільного розсіювання назад для провідників будь-якої розмірності є

$$\lambda(E) = 2 \frac{\langle v_x^2 \tau \rangle}{\langle |v_x| \rangle},$$

де усереднення виконується за кутами. Для ізотропних зон

$$\lambda_{2D}(E) = \frac{\pi}{2} v(E)\tau(E), \quad (21б)$$

$$\lambda_{3D}(E) = \frac{4}{3} v(E)\tau(E). \quad (21в)$$

Для часу розсіювання часто використовується степеневий закон розсіювання

$$\tau(E) = \tau_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^s, \quad (22)$$

у якому показник степеня s ідентифікує різні механізми розсіювання: для розсіювання акустичних фононів в 3D провіднику з параболічною дисперсією $s = -1/2$, а для розсіювання на заряджених домішках $s = +3/2$ [7].

Аналогічний степеневий закон часто використовується й для середнього шляху вільного пробігу:

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r. \quad (23)$$

Для параболічної зонної структури $v(E) \propto E^{1/2}$, так що $r = s + 1/2$ із $r = 0$ для розсіювання на акустичних фононах і $r = 2$ для розсіювання на заряджених домішках.

Вертаючись до нашого первісного завдання вивести (17) з (20), відповідно до (21в) маємо

$$\lambda_{ph}(\hbar\omega) = \frac{4}{3} v_{ph}(\hbar\omega) \tau_{ph}(\hbar\omega), \quad (24)$$

а з урахуванням (21а) –

$$v_{ph}(\hbar\omega) \tau_{ph}(\hbar\omega) = \Lambda_{ph}(\hbar\omega), \quad (25)$$

і остаточно

$$\lambda_{ph}(\hbar\omega) = \frac{4}{3} \Lambda_{ph}(\hbar\omega). \quad (26)$$

Згідно (18) з [1], для 3D провідника число мод провідності для електронів пов'язано із густиною станів:

$$M_{el}(E) = AM_{3D}(E) = A \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E). \quad (27)$$

Перепишемо цю формулу стосовно фононів. Пам'ятаємо, що виродження електронів по спіну $g_s = 2$ враховується в густині станів:

$$D_{3D}(E) = 2D'_{3D}(E), \quad (28)$$

а для сферичних зон в 3D провіднику

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{v_{el}(E)}{2}. \quad (29)$$

Збираючи разом (27) – (29) для випадку фононів маємо

$$M_{ph}(\hbar\omega) = A \frac{\hbar}{2} \left(\frac{v_{ph}(\hbar\omega)}{2} \right) 2D_{ph}(\hbar\omega) = A \frac{\hbar}{4} v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega). \quad (30)$$

Підстановка (26) і (30) в (20) дає

$$\kappa_L = \left[\frac{\frac{1}{3} \int_0^\infty \Lambda_{ph}(\hbar\omega) v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \right] C_V. \quad (31)$$

Перемноживши й розділивши (31) на

$$\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (32)$$

ми одержуємо шукане рівняння (17) з коефіцієнтом пропорційності між κ_L і C_V у вигляді добутку усередненої належним чином середньої довжини зведеного пробігу

$$\langle\langle \Lambda_{ph} \rangle\rangle \equiv \frac{\int_0^\infty \Lambda_{ph}(\hbar\omega) v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \quad (33)$$

і середньої швидкості

$$\langle v_{ph} \rangle \equiv \frac{\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}, \quad (34)$$

також належним чином усередненої.

Рівняння (17) часто використовується для оцінки середньої довжини зведеного пробігу по експериментально вимірюваних κ_L і C_V , якщо нам відома середня швидкість, під якою звичайно мають на увазі поздовжню звукову швидкість. Наведений нами висновок дає точне визначення таких понять, як $\langle\langle \Lambda_{ph} \rangle\rangle$ і $\langle v_{ph} \rangle$. Вибравши фононну дисперсію, середню швидкість завжди можна розрахувати згідно з (34), і обчислена в такий спосіб швидкість звичайно сильно відрізняється від поздовжньої складової швидкості звуку. У цілому можна стверджувати, що оцінки середнього значення довжини вільного пробігу можуть бути помилкові, якщо опиратися на поздовжню звукову швидкість [8].

Дебаївська модель

Розрізняють три стани поляризації ґраткових коливань: один відповідає коливанням атомів у тому ж напрямку, в якому поширюються коливання – поздовжні моди (longitudinal/L), а інший – у напрямку, перпендикулярному до того, у якому поширюються коливання – поперечні моди (transverse/T). Є ще третій тип мод (flexural/Z), що відповідають коливанням у напрямку, перпендикулярному одночасно обом модам L і T . Низькоенергетичні моди називають акустичними (acoustic/A). Одна з них – мода LA відповідає звуковій хвилі. Поблизу $q \rightarrow 0$ дисперсії мод LA і TA лінійні

$$\hbar\omega = \hbar v_D q, \quad (35)$$

що відомо як дебаївське наближення. Дебаївська швидкість v_D є швидкість, усереднена по двох модах – LA й TA. У випадку моди LA швидкість v_D є просто швидкість звуку $v_s \propto m^{-1/2}$, де m – ефективна маса коливного атома. Типове значення $v_s \approx 5 \times 10^3$ м/с, що в 20 разів менше швидкості електрона.

Типова ширина зони BW електронної дисперсії $BW \ll kT$, так що зайняті тільки стани поблизу дна зони провідності, де непогано працює модель ефективної маси. Для фононів ситуація суттєво інша. Ширина зони $BW \approx kT$, так що зайняті всі стани в зоні Бріллюена. Широкозастосовне дебаївське наближення (35) добре описує фононні акустичні гілки, якщо тільки q не сильно віддаляється від центру зони Бріллюена.

У дебаївському наближенні (35) густина фононних станів

$$D_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{2\pi^2(\hbar v_D)^3}, \quad (36)$$

де трійка враховує три моди поляризації. Тоді згідно з (30) число фононних мод на одиницю площі поперечного перерізу

$$M_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{4\pi(\hbar v_D)^2}. \quad (37)$$

Оскільки всі стани в зоні Бріллюена прагнуть бути зайнятими за помірних температур, ми впевнені, що врахували всі стани. У кристалі на одиницю об'єму доводиться $3N/\Omega$ станів. Щоб знайти повне число станів потрібно проінтегрувати густину станів

$$\int_0^{\hbar\omega_D} D_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega) \quad (38)$$

з верхньою межею \hbar , помножену на так звану дебаївську частоту, щоб одержати правильне число станів, а саме:

$$\hbar\omega_D = \hbar v_D \left(\frac{6\pi^2 N}{\Omega} \right)^{1/3} \equiv kT_D. \quad (39)$$

Дебаївська частота визначається як частота, вище якої стани вже не враховуються. Це обмеження можна також урахувати через граничний хвильовий вектор q_D або через дебаївську температуру

$$T_D = \hbar\omega / k. \quad (40)$$

Для температури $T \ll T_D$ зайняті тільки стани з $q \rightarrow 0$, для яких дебаївське наближення достатньо прийнятне.

Тепер можемо обчислити ґраткову теплопровідність шляхом інтегрування (11) до граничної дебаївської енергії –

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T^{\hbar\omega_D}}{3\hbar} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega) \quad (41)$$

з урахуванням $M_{ph}(\hbar\omega)$ згідно з (37). Цей інтеграл можна взяти чисельно або ж аналітично, якщо використовувати підходящий вираз для фононної довжини вільного пробігу. Саме так уперше було обчислено ґраткову теплопровідність [9, 10]. Теорія й обчислювальні методи розрахунків термоелектричних транспортних коефіцієнтів були далі розвинені в [6, 8, 11].

Розсіювання фононів

Фонони розсіюються на дефектах, домішкових атомах, ізотопах, на поверхнях і границях, на електронах і на інших фонах. Фонон-фононне розсіювання зобов'язане тому, що потенціальна енергія зв'язків у кристалі не є строго гармонійною. Прийнято усе більш вищі ступені зміщення враховувати як потенціал розсіювання. Розглядаються звичайно два типи фононного розсіювання. У звичайному процесі два фонони взаємодіючи породжують третій фонон, при цьому імпульс і енергія зберігаються:

$$\begin{aligned} \hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 &= \hbar\vec{q}_3 \\ \hbar\vec{w}_1 + \hbar\vec{w}_2 &= \hbar\vec{w}_3 \end{aligned} \quad (42)$$

Повний імпульс ансамблю фононів зберігається. Цей тип розсіювання практично не позначається на потоці тепла.

Є другий тип розсіювання (umklapp/U), коли імпульс при взаємодії двох вихідних фононів не зберігається й результуючий фонон в результаті ангармонічності фонон-фононної й електрон-фононної взаємодій має настільки великий імпульс, що він виявляється за межами зони Бріллюена.

Саме U -процеси забезпечують перенос тепла особливо за високих температур. Важливу роль відіграють також розсіювання на дефектах (defects/D) і на границях (boundaries/B). Швидкості розсіювання складаються так, що сумарна швидкість розсіювання

$$\frac{1}{\tau_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \quad (43)$$

або, що аналогічно, через довжини вільного пробігу (24)

$$\frac{1}{\lambda_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\lambda_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_B(\hbar\omega)}. \quad (44)$$

Вивчено закономірності для різних класів розсіювання [12]. Для розсіювання на точкових дефектах

$$\frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} \propto \omega^4, \quad (45)$$

відомому як релеєвське розсіювання.

У випадку розсіювання на границях і поверхнях

$$\frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \propto \frac{v_{ph}(\hbar\omega)}{L}, \quad (46)$$

де L є найменший вимір області, розсіювання.

Для U -розсіювання зазвичай використовується швидкість

$$\frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} \propto T^3 \omega^2 e^{-T_D/bT}. \quad (47)$$

Цих відомостей досить, щоб пояснити температурну залежність граткової теплопровідності.

Температурна залежність граткової теплопровідності

Залежність граткової теплопровідності κ_L від температури проілюструємо на прикладі масивного зразка Si (рис. 1).

Згідно з (13) κ_L пропорційна числу заселених фононних мод $\langle M_{ph} / A \rangle$ і усередненій належним чином середній довжині вільного пробігу фононів $\langle\langle \lambda_{ph} \rangle\rangle$. Хід $\kappa_L(T)$ можна пояснити, опираючись на залежність $\langle M_{ph} \rangle$ і $\langle\langle \lambda_{ph} \rangle\rangle$ від температури.

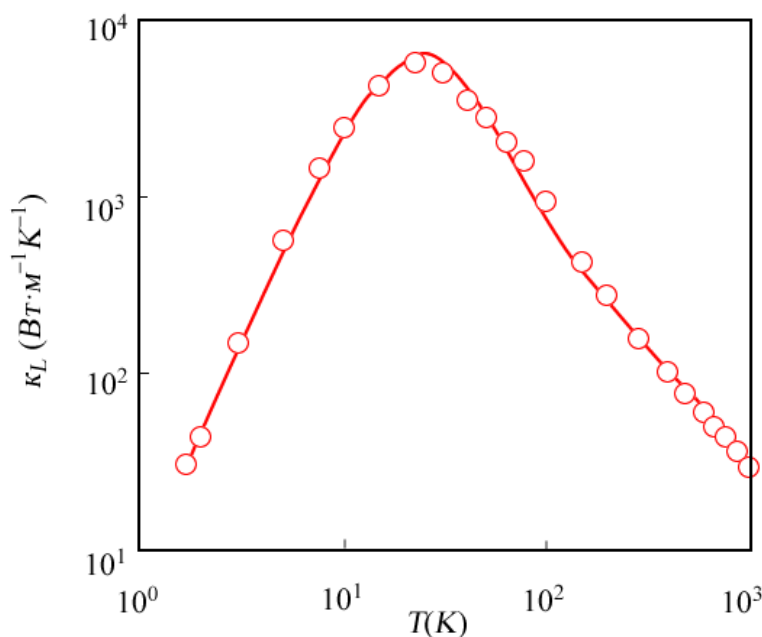


Рис 1. Експериментально виміряна [13] і розрахована [8] температурна залежність ґраткової теплопровідності κ_L масивного зразка Si.

На основі рівняння (12) можна показати, що за низьких температур

$$\langle M_{ph} \rangle \propto T^3, \quad (T \rightarrow 0), \quad (48)$$

так що первісний ріст теплопровідності (рис. 1) зв'язують із тією обставиною, що число заселених фононних мод швидко зростає з температурою. За низьких температур важливу роль відіграє розсіювання на граничних поверхнях. У міру зростання температури усе більше генерується короткохвильових фононів. Ці фонони розсіюються на точкових дефектах, і ці процеси розсіювання стають усе більш і більш важливими. У міру наближення температури до T_D заселяються всі фононні моди й далі збільшення температури вже не призводить до зміни $\langle M_{ph} \rangle$. Замість цього підвищення температури ініціює все зростаюче U -розсіювання фононів, і теплопровідність починає падати з далішим збільшенням температури.

Відмінність між ґратковою теплопровідністю й електричною провідністю

Ми вже звертали увагу на схожість фононних транспортних рівнянь (9) і (13) і електронних (15) і (16). Середні довжини вільного пробігу електронів і фононів одного порядку. Чому ж тоді електрична провідність речовин варіює по величині в широких межах на багато порядків, тоді як ґраткова теплопровідність змінюється в межах лише декількох порядків? Відповідь криється у фермієвських віконних функціях провідності (79) і (81) з [1]. І для електронів, і для фононів підвищення температури уширює вікна й збільшує заселеність станів.

Для електронів, однак, положення фермієвського рівня суттєво позначається на величині віконної функції. Контролюючи значення електрохімічного потенціалу, електричну провідність можна змінювати в широких межах. У випадку ж фононів ширина вікна визначається тільки температурою.

Ще одна істотна відмінність між електронами й фононами пов'язана з тим, як заселені стани. Коли $E_F \approx E_C$, електронні й фононні віконні функції досить схожі. Однак же у випадку електронів ширина дисперсійних зон досить значна, так що заселена лише невелика частина зони поблизу дна зони провідності: успішно працює наближення ефективної маси, легко одержати аналітичні розв'язки. У фононів ширина дисперсійної зони винятково мала. За помірних температур усі стани в зоні Бріллюена заселені: прості аналітичні розв'язки не працюють, аналітичні розв'язки для ґраткової теплопровідності одержати неможливо.

Квантування ґраткової теплопровідності

За аналогією із квантуванням електронної провідності

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

більше 30 років тому Дж. Пендрі [14] дійшов висновку щодо наявності квантових обмежень на потік тепла. Справді за $T \rightarrow 0$ в рівнянні (82) роботи [1] віконна функція $W_{ph}(\hbar\omega)$ різко заго-струється й у межі $\hbar\omega = 0$

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} T_{ph}(0) M_{ph}(0). \quad (50)$$

Якщо для масивного провідника $M_{ph}(\hbar\omega) \rightarrow 0$ в міру того як $\hbar\omega \rightarrow 0$, то для нанорезисторів таких як нанодріт або нанострічка, число фононних мод залишається кінцевим. У випадку балістичного транспорту $T_{ph} = 1$ й слід очікувати, що

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} M_{ph}. \quad (51)$$

Саме цей висновок був підтверджений експериментально на чотирьохмодовому резисторі за $T < 0.8K$ [15] так, що цей видатний результат та наступні за ним вимірювання балістичної теплопровідності за наднизьких температур підтвердили раніше передбачене квантування для 1D балістичних резисторів [16 – 18].

Квант теплопровідності

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / 3h \quad (52)$$

є максимальна енергія, що переноситься в перерахунку на одну фононну моду. Дивно, що квант теплопровідності не пов'язаний зі статистикою часток: він універсальний і для бозонів, і для ферміонів, і для аньєнів [19 – 21].

Висновки

Основний висновок цієї статті й попередньої [1] полягає в тому, що модель Ландауера – Датти – Лундстрома переносу електронів і тепла добре працює як для нано-, так і для мікро- і макропровідників. Якщо зонна структура задана аналітично або чисельно, завжди можна оцінити число мод провідності, а за обраної або встановленої моделі для середнього шляху вільного пробігу квазірівноважні термоелектричні транспортні коефіцієнти можна обчислити для провідників будь-якої розмірності й довільного масштабу як у балістичному, квазібалістичному, так і в дифузійному режимах за наявності як різниці потенціалів на кінцях провідника, так і різниці температур.

На закінчення ми зібрали разом корисні вирази для термоелектричних коефіцієнтів через інтеграли Фермі – Дірака як для напівпровідників з параболічною дисперсією, так і для графену з лінійною дисперсією в балістичному й дифузійному режимах [22].

Додаток А.

Термоелектричні коефіцієнти для 1D, 2D і 3D провідників з параболічною зонною структурою в балістичному й дифузійному режимах

Термоелектричні коефіцієнти виражені через інтеграли Фермі – Дірака порядку j

$$\mathfrak{F}_j(\eta_F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\eta^j}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta,$$

у яких положення фермієвського рівня E_F відносно дна зони провідності. E_C визначається безрозмірним параметром

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

У наведених виразах термоелектричні коефіцієнти провідників у дифузійному режимі виписані для степеневого закону розсіювання

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

Термоелектричні коефіцієнти для 1D балістичних резисторів:

$$G = \frac{2q^2}{h} \mathfrak{S}_{-1}(\eta_F); \quad S_T = -\frac{k}{q} \frac{2q^2}{h} [\mathfrak{S}_0(\eta_F) - \eta_F \mathfrak{S}_{-1}(\eta_F)]; \quad S = -\frac{k}{q} \left[\frac{\mathfrak{S}_0(\eta_F)}{\mathfrak{S}_{-1}(\eta_F)} - \eta_F \right];$$

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

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

Термоелектричні коефіцієнти для 1D дифузійних резисторів:

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

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

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

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

Провідність $G = \sigma_{1D} / L$ вимірюється в Сіменсах: $[\sigma_{1D}] = 1 \text{См} \cdot \text{м}$ і аналогічно для інших питомих коефіцієнтів: $s_T = S_T L$; $\kappa_0 = K_0 L$; $\kappa = K L$.

Термоелектричні коефіцієнти для 2D балістичних резисторів:

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

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

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

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

Термоелектричні коефіцієнти для 2D дифузійних резисторів:

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

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

$$K_0 = WT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{\sqrt{2m^*kT}}{\pi h} \times$$

$$\times \left[\Gamma(r + \frac{7}{2}) \mathfrak{S}_{r+3/2}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r + \frac{5}{2}) \mathfrak{S}_{r+1/2}(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r + \frac{3}{2}) \mathfrak{S}_{r-1/2}(\eta_F) \right];$$

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

Провідність $G = \sigma_{2D} W / L$ вимірюється в Сіменсах: $[\sigma_{2D}] = 1 \text{См}$ і аналогічно для інших питомих коефіцієнтів: $s_T = S_T L / W$; $\kappa_0 = K_0 L / W$; $\kappa = KL / W$.

Термоелектричні коефіцієнти для 3D балістичних резисторів:

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

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

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

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

Термоелектричні коефіцієнти для 3D дифузійних резисторів:

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

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

$$K_0 = AT \left(\frac{k}{q} \right)^2 \frac{2q^2}{h} \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \left[\Gamma(r+4) \mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) - 2\eta_F \Gamma(r+3) \mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) + \eta_F^2 \Gamma(r+2) \mathfrak{Z}_r(\eta_F) \right];$$

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

Провідність $G = \sigma_{3D} A / L$ вимірюється в Сіменсах: $[\sigma_{3D}] = 1 \text{ См} / \text{ м}$ й аналогічно для інших питомих коефіцієнтів: $s_T = S_T L / A$; $\kappa_0 = K_0 L / A$; $\kappa = K L / A$.

Додаток Б.

Термоелектричні коефіцієнти для графену з лінійною дисперсією в балістичному й дифузійному режимах

Графен є 2D провідником з унікальною лінійною зонною структурою $E(k) = \pm \hbar v_F k$. Його транспортні коефіцієнти розраховані за рівняннями (65) і (67) роботи [1] із числом мод $M(E) = W \cdot 2 |E| / \pi \hbar v_F$. Використовується такий же степеневий закон розсіювання для дифузійного режиму, як і в Додатку А.

Провідність $G = \sigma W / L$ вимірюється в Сіменсах: $[\sigma] = 1 \text{ См}$ і аналогічно для інших питомих коефіцієнтів: $s_T = S_T L / W$; $\kappa_0 = K_0 L / W$; $\kappa = K L / W$.

Балістичний режим:

$$G^{ball} = W \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left[\mathfrak{Z}_0(\eta_F) + \mathfrak{Z}_0(-\eta_F) \right]; \quad S^{ball} = -\frac{k}{q} \left\{ \frac{2[\mathfrak{Z}_1(\eta_F) - \mathfrak{Z}_1(-\eta_F)]}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F) + \mathfrak{Z}_0(-\eta_F)} - \eta_F \right\};$$

$$S_T^{ball} = -W \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left(\frac{k}{q} \right) \left\{ 2[\mathfrak{Z}_1(\eta_F) - \mathfrak{Z}_1(-\eta_F)] - \eta_F [\mathfrak{Z}_0(\eta_F) + \mathfrak{Z}_0(-\eta_F)] \right\};$$

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

$$K_0^{ball} = WT \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left(\frac{k}{q} \right)^2 \times$$

$$\times \left\{ 6[\mathfrak{Z}_2(\eta_F) + \mathfrak{Z}_2(-\eta_F)] - 4\eta_F [\mathfrak{Z}_1(\eta_F) - \mathfrak{Z}_1(-\eta_F)] + \eta_F^2 [\mathfrak{Z}_0(\eta_F) + \mathfrak{Z}_0(-\eta_F)] \right\}.$$

Дифузійний режим:

$$G^{diff} = W \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+2) \left[\mathfrak{Z}_r(\eta_F) + \mathfrak{Z}_r(-\eta_F) \right];$$

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

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

$$K = WT \frac{2q^2}{h} \left(\frac{k}{q} \right)^2 \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \times$$

$$\times \Gamma(r+3) \left\{ (r+3)[\mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) + \mathfrak{Z}_{r+2}(-\eta_F)] - \frac{(r+2)[\mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) - \mathfrak{Z}_{r+1}(-\eta_F)]^2}{\mathfrak{Z}_r(\eta_F) + \mathfrak{Z}_r(-\eta_F)} \right\};$$

$$K_0 = WT \frac{2q^2}{h} \left(\frac{k}{q} \right)^2 \left(\frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \times$$

$$\times \left\{ \frac{\Gamma(r+4)[\mathfrak{Z}_{r+2}(\eta_F) + \mathfrak{Z}_{r+2}(-\eta_F)] - 2\eta_F \Gamma(r+3)[\mathfrak{Z}_{r+1}(\eta_F) + \mathfrak{Z}_{r+1}(-\eta_F)]}{+\eta_F^2 \Gamma(r+2)[\mathfrak{Z}_r(\eta_F) + \mathfrak{Z}_r(-\eta_F)]} + \right\}.$$

Література

1. Кругляк Ю.А. Електричний струм, термострум і тепловий потік в нано- і мікроелектроніці: модель переносу / Ю.А. Кругляк // Термоелектрика. –2014. – N 6. – С.
2. Займан Дж. Принципи теорії твердого тела / Дж. Займан // (Высшая школа, Москва, 1974).
3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель // (Наука, Москва, 1978).
4. Ашкрофт Н. Физика твердого тела. – / Н. Ашкрофт, Н. Мермин // тома 1 и 2 (Мир, Москва, 1979).
5. Л.И. Анатычук, Термоелектричество. Т. 1. Физика термоелектричества (Букрек, Черновцы, 2009).
6. C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, J. Appl. Phys. **107**, 023707 (2010).
7. M. Lundstrom, Fundamentals of Carrier Transport (Cambridge University Press, Cambridge, 2012).
8. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, J. Appl. Phys. **109**, 073718 (2011).
9. J. Callaway, Phys. Rev. **113**, 1046 (1959).
10. M.G. Holland, Phys. Rev. **132**, 2461 (1963).
11. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, J. Appl. Phys. **111**, 093708 (2012).
12. C. Gang, Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons (Oxford University Press, New York, 2005).
13. C.J. Glassbrenner and G.A. Slack, Phys. Rev. A, **134**, 1058 (1964).
14. J.B. Pendry, J. Phys. A, **16**, 2161 (1983).
15. K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, Nature, **404**, 974 (2000).
16. D.E. Angelescu, M.C. Cross, and M.L. Roukes, Superlatt. Microstruct. **23**, 673 (1998).
17. L.G.C. Rego, and G. Kirczenow, Phys. Rev. Lett. **81**, 232 (1998).

18. M.P. Blencowe, Phys. Rev. B, **59**, 4992 (1999).
19. L.G.C. Rego, and G. Kirczenow, Phys. Rev. B, **59**, 13080 (1999).
20. I.V. Krive, and E.R. Mucciolo, Phys. Rev. B, **60**, 1429 (1999).
21. C.M. Caves, and P.D. Drummond, Rev. Mod. Phys. **66**, 481 (1994).
22. R.S. Kim, Physics and simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices (Purdue University, West Lafayette, 2011).

Надійшла до редакції 21.11.2014