

УДК 537.32, PACS number(s): 63.22.-m, 65.80.-g, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 73.50.Lw, 74.25.fg, 84.60.Rb, 85.80.Fi

ПЕРЕНОС ТЕПЛА ФОНОНАМИ В ОБОБЩЕННОЙ ТРАНСПОРТНОЙ МОДЕЛИ

Ю. А. Кругляк, проф.,
Н. З. Штефан, асс.

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, amalon.7@gmail.com

С позиций транспортной модели Ландауэра – Датты – Лундстрема строится обобщенная модель переноса тепла фононами. Аналогично фермиевскому окну электронной проводимости вводится понятие фермиевского окна фононной проводимости и через него выводится общее выражение для решеточной теплопроводности, в котором с самого начала фигурирует квант теплопроводности. Подчеркивается подобие и различия в построении теории электронной проводимости и теории теплопроводности. Подробно рассматривается теплопроводность проводников, вскрывается физический смысл пропорциональности между удельной теплопроводностью и удельной теплоемкостью при постоянном объеме, выводится связь между коэффициентом прохождения и средней длиной свободного пробега, обсуждаются вычисление числа фононных мод и плотности фононных состояний, особенности дебаевской модели теплопроводности и рассеяния фононов, температурная зависимость решеточной теплопроводности, различие между решеточной теплопроводностью и электронной проводимостью и квантование теплопроводности.

Ключевые слова: нанофизика, наноэлектроника, фононный транспорт, квант теплопроводности, коэффициент прохождения, фононные моды, дебаевская модель, рассеяние фононов.

1. ВВЕДЕНИЕ

При транспорте электронов переносится как заряд, так и тепло. В металлах почти все тепло переносится электронами, а в полупроводниках только меньшая часть тепла переносится электронами, и почти все тепло переносится фононами.

Поток тепла, вызванный транспортом фононов вдоль проводника (ось x)

$$J_{Qx}^{ph} = -\kappa_L \frac{dT}{dx}, \quad [\text{Вт/м}^2], \quad (1)$$

где коэффициентом пропорциональности потока тепла градиенту температуры является удельная решеточная теплопроводность κ_L . У алмаза, одного из лучших проводников тепла, $\kappa_L \approx 2000$ Вт/м·К, у такого плохого проводника тепла как стекло $\kappa_L \approx 1$ Вт/м·К, а у воздуха $\kappa_L \approx 0.025$ Вт/м·К. Если электрическая проводимость твердых материалов меняется на 20 и больше порядков, то их решеточная теплопроводность изменяется всего на 3–4 порядка. Тем не менее, есть много общего в описании переноса тепла электронами и фононами в рамках обобщенной транспортной модели Ландауэра –

Датты – Лундстрема (ЛДЛ) [1–4].

Далее упомянем лишь необходимые нам сведения о фононах. Физика фононов подробно изложена в [5–8]. Характерный ход дисперсии $E(k)$ для электронов качественно показан на рис. 1, а дисперсии $\hbar\omega(q)$ для фононов – на рис. 2.

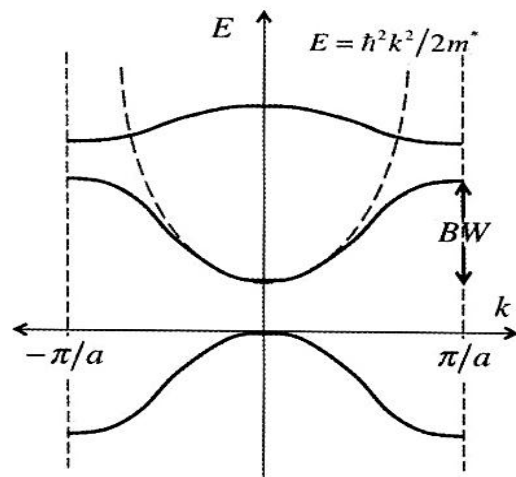


Рис. 1 – Упрощенная зонная структура. Ширина зоны проводимости помечена BW/Band Width. Часто используемая параболическая дисперсия показана пунктиром.

Кристаллическая решетка периодична в реальном пространстве, а дисперсия – в k -пространстве. Аналогично для фононов: только в q -пространстве. В обоих случаях решения реализуются в зоне Бриллюэна и ширины обеих зон конечны.

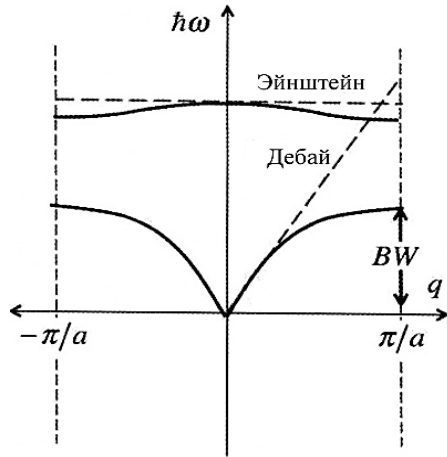


Рис. 2 – Упрощенный ход дисперсии для фононов. Пунктиром показаны простейшие модели Эйнштейна и Дебая.

Подробнее ход дисперсии для фононов показан на рис. 3.

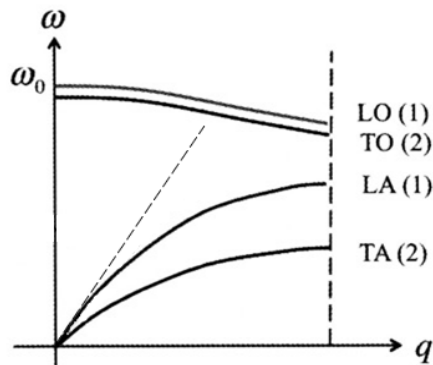


Рис. 3– Дисперсионные кривые для фононов.

Для кристаллических 3D проводников при распространении колебаний по решетке возможны три состояния поляризации: одно продольное, в направлении распространения колебаний (longitudinal/L) и два поперечных (transverse/T). В области низких энергий фононные моды называют акустическими/A. Вблизи нулевых волновых чисел ($q \rightarrow 0$) у акустических мод дисперсия линейная. Для продольной акустической моды LA:

$$\omega(q) = v_s q, \quad (2a)$$

с

$$v_s = \sqrt{k_{elas} / m_{eff}}, \quad (2б)$$

где скорость звука v_s определяется упругой постоянной k_{elas} и массой m_{eff} . Характерные скорости звука порядка 5×10^3 м/с, что примерно в 20 раз меньше скорости электронов. Из уравнений 2 следует, что у веществ с тяжелыми атомами скорость звука меньше и соответственно меньше ширина фоновой зоны дисперсии по сравнению с веществами из легких атомов.

На рис. 3 показаны также три оптические моды. Дисперсия этих мод незначительна: частота L и T оптических мод сравнительно мало зависит от q . Различие между акустическими и оптическими модами состоит в том, что в области малых $q \approx 0$ соседние атомы смещаются в одном и том же направлении для акустических мод и в противоположных направлениях для оптических мод. В полярных веществах свет взаимодействует с оптическими модами; отсюда и их название. Скорость фононов определяется наклоном зависимости частоты от смещения $\omega(q)$: акустические моды характеризуются относительной большей скоростью фононов по сравнению с оптическими модами. Поэтому можно ожидать, что именно акустические моды переносят большую часть тепла.

В качестве реалистического примера приводим фононный спектр графена (рис. 4), построенный на основе экспериментальных данных, хорошо согласующихся с результатами расчетов методами теории функционала плотности [9–11].

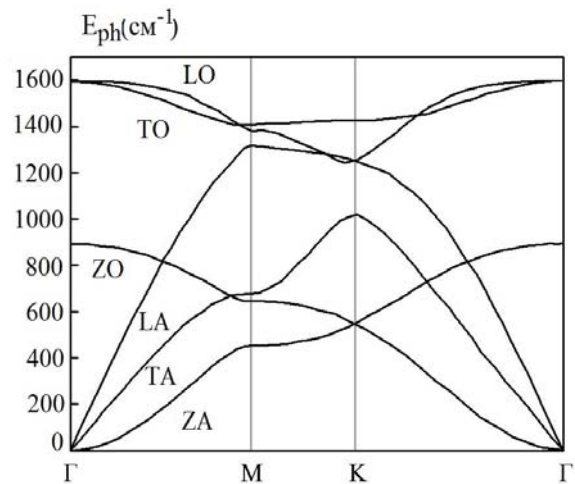


Рис. 4 - Фононный спектр графена, опирающийся на совокупные экспериментальные и расчетные данные.

В элементарной ячейке графена два атома углерода, что обуславливает наличие в спектре дисперсии графена шести фононных ветвей – трех оптических (LO, TO, ZO) и трех акустических (LA, TA, ZA). Последние связаны со смещением всей ячейки из положения равновесия, а оптическим модам отвечают сдвиги атомов в самой элементарной ячейке с сохранением положения центра масс. Фононные моды LA и TA соответствуют продольным и поперечным колебаниям атомов углерода в плоскости графена, а мода ZA (flexural mode/Z) – колебаниям атомов углерода в направлении, перпендикулярном направлению колебаний мод LA и TA, с выходом атомов из плоскости графена. Моды LA и TA имеют линейную дисперсию; соответствующие этим модам скорости звука составляют 21300 и 13600 м/с, соответственно. Все теплофизические свойства графена (теплопроводность, теплоемкость и др.) определяются фононами.

2. ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ТЕПЛА ФОНОНАМИ

Электрический ток в обобщенной транспортной модели ЛДЛ [12]

$$I = \frac{2q}{h} \int T_{el}(E) M_{el}(E) (f_1 - f_2) dE \quad [A] \quad (3)$$

пропорционален произведению коэффициента прохождения $T_{el}(E)$ или иначе вероятности прохождения проводника по каналу проводимости энергии E , числу мод проводимости $M_{el}(E)$ при этой энергии и разности фермиевских функций на контактах проводника.

Для описания транспорта фононов нам необходимо уравнение, аналогичное (3). Как и в случае электронов, контакты на концах проводника достаточно массивны настолько, чтобы поддерживать тепловое равновесие фононов при разных температурах контактов. Если в случае электронов состояния контактов заселяются в соответствии со статистикой Ферми – Дирака, то в случае фононов – в соответствии со статистикой Бозе – Эйнштейна

$$n_0(\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (4)$$

Пусть температура на левом и правом контактах будет соответственно T_1 и T_2 . Как и в случае электронов, предполагается, что контакты идеальные, другими словами, отражение фоно-

нов на контактах не происходит, и коэффициент прохождения действительно соответствует прохождению фононов через весь канал проводимости.

Теперь легко переписать выражение (3) применительно к фононам. Для потока фононов энергию электронов E заменим на энергию фононов $\hbar\omega$. В случае электронов переносятся заряды q , а в случае фононов – кванты энергии $\hbar\omega$: заменим q на $\hbar\omega$ и внесем $\hbar\omega$ под знак интеграла. Двойка в уравнении (3) для тока электронов соответствует вырождению по спину. Исключим ее из уравнения для фононов, а число состояний поляризации фононов включим в число фононных мод $M_{ph}(\hbar\omega)$. Окончательно для тепла, переносимого фононами, имеем

$$Q = \frac{1}{h} \int (\hbar\omega) T_{ph}(\hbar\omega) M_{ph}(\hbar\omega) (n_1 - n_2) d(\hbar\omega). \quad (5)$$

Как и в случае электронов, нас интересует режим квази-равновесного транспорта. В этом режиме $T_1 \approx T_2$ и $n_0 \approx n_1 \approx n_2 \approx n_0$, что позволяет разложить n_2 относительно n_1 в ряд Тейлора и ограничиться первым порядком

$$n_2 \approx n_1 + \frac{\partial n_0}{\partial T} \Delta T, \quad (6)$$

так что нужная нам разность

$$n_1 - n_2 \approx -\frac{\partial n_0}{\partial T} \Delta T. \quad (7)$$

Производную $\partial n_0 / \partial T$ находим путем дифференцирования бозевского распределения (4):

$$\frac{\partial n_0}{\partial T} = \frac{\hbar\omega}{T} \left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right), \quad (8)$$

где

$$\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} = \left(-\frac{1}{kT} \right) \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^2}. \quad (9)$$

Теперь уравнение (5) для малой разности температур на контактах можно переписать следующим образом

$$Q = -K_L \Delta T, \quad (10)$$

где решеточная теплопроводность

$$K_L = \frac{k^2 T}{h} \int T_{ph}(\hbar\omega) M_{ph}(\hbar\omega) \left[\left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right) \right] d(\hbar\omega) \text{ [Вт/К]} \quad (11)$$

Уравнение (10) есть закон теплопроводности Фурье, согласно которому поток тепла антинаправлен градиенту температуры. Полезно обратить внимание на следующую схожесть теплопроводности (11) и электронной проводимости

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T_{el}(E) M_{el}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (12)$$

Производная

$$W_{el}(E) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \quad (13)$$

известна как фермиевское окно проводимости, выделяющее те моды проводника, которые только и могут внести вклад в электронную проводимость. Окно проводимости нормировано на единицу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = 1 \quad (14)$$

Аналогичную роль окна проводимости для фононов играет следующее выражение

$$W_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \left(\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right), \quad (15)$$

в котором численный коэффициент необходим для нормировки на единицу выражения в квадратных скобках уравнения (11)

$$\int_0^{+\infty} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right) d(\hbar\omega) = \frac{\pi^2}{3}, \quad (16)$$

так что окончательно решеточная теплопроводность

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \times \int T_{ph}(\hbar\omega) M_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega) \quad (17)$$

В этом выражении численный коэффициент

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / 3h \approx (9.456 \times 10^{-13} \text{ Вт} / \text{К}^2) T, \quad (18)$$

который мы обсудим позже, есть квант теплопроводности, впервые подтвержденный экспериментально в 2000 году [13].

Сравнивая выражения для решеточной теплопроводности (17) и электронной проводимости (12), опять убеждается в их схожести: и та и другая проводимости пропорциональны соответствующему кванту проводимости, умноженному на интеграл от произведения трех величин – коэффициента прохождения, числа мод и окна проводимости.

Профили окон проводимости для электронов и фононов показаны на рисунках 5 и 6.

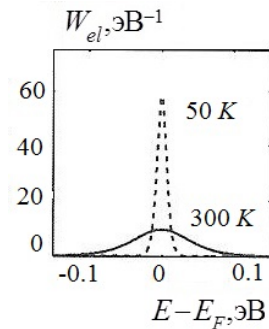


Рис. 5 – Окно проводимости для электронов (13) при двух разных температурах. Энергия E может быть как больше фермиевской, так и меньше ее.

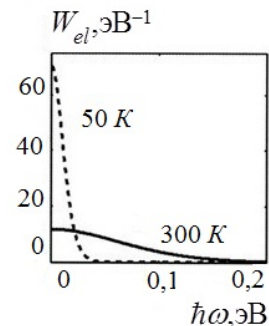


Рис. 6 - Окно проводимости для фононов (15) при двух разных температурах. Энергия фононов может быть только положительной.

Окна проводимости для электронов и фононов не только схожи, но и имеют приблизительно одинаковую ширину в $\pm 2 kT$.

2.1 Теплопроводность массивных проводников

Теплопроводность диффузионных проводников является их ключевым свойством, определяющим работоспособность разнообразных электронных устройств. По аналогии с транспортом электронов (ф-ла (86) из [12]) коэффициент прохождения для фононов

$$T_{ph}(\hbar\omega) = \frac{\lambda_{ph}(\hbar\omega)}{\lambda_{ph}(\hbar\omega) + L} \Big|_{L \gg \lambda_{ph}} \rightarrow \frac{\lambda_{ph}(\hbar\omega)}{L}, \quad (19)$$

где L – длина 3D проводника, а $\lambda_{ph}(\hbar\omega)$ есть длина свободного пробега фонона частоты ω . Кроме того, число фононных мод, очевидно, пропорционально площади поперечного сечения 3D проводника

$$M_{ph}(\hbar\omega) \propto A. \quad (20)$$

Умножая и деля уравнение (10) на A/L , получаем

$$Q = - \left(K_L \frac{L}{A} \right) A \frac{dT}{L}, \quad (21)$$

откуда следует постулированное в самом начале уравнение (1) для потока тепла

$$\frac{Q}{A} \equiv J_{Qx}^{ph} = -\kappa_L \frac{dT}{dx} \quad (22)$$

с удельной решеточной теплопроводностью

$$\kappa_L = K_L \frac{L}{A} \quad (23)$$

или после подстановки (19) в (17) в развернутом виде окончательно получаем

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \times \int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega). \quad (24)$$

Поскольку именно окно проводимости фононов $W_{ph}(\hbar\omega)$ определяет, какие именно фононные моды могут принимать участие в проводимости тепла, естественно ввести среднее число

активных фононных мод на единицу площади поперечного сечения проводника

$$\langle M_{ph} / A \rangle \equiv \int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (25)$$

так что в компактном виде

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \langle M_{ph} / A \rangle \langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle, \quad (26)$$

где усредненное значение длины свободного пробега фононов

$$\langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle = \frac{\int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}. \quad (27)$$

Итак, паре фононных транспортных уравнений (22) и (26) соответствует схожая по форме пара электронных транспортных уравнений [12]:

$$J_x = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F)}{dx}, \quad (28)$$

$$\sigma = \frac{2q^2}{h} \langle M_{el} / A \rangle \langle \langle \lambda_{el} \rangle \rangle. \quad (29)$$

Градиент электрохимического потенциала вызывает поток электронов, а градиент температуры – поток тепла. Термоэлектрические коэффициенты (26) и (29) имеют одинаковую структуру. Это всегда произведение соответствующего кванта проводимости на число мод проводимости, участвующих в транспорте, и на усредненное значение средней длины свободного пробега соответствующего носителя (тока или тепла). К оценке этих трех величин для фононов мы вернемся позже.

2.2 Удельная теплоемкость

Хорошо известна пропорциональность между удельной теплопроводностью и удельной теплоемкостью при постоянном объеме C_V [5–8]. Установим эту связь и покажем, что коэффициент пропорциональности между ними определяется усредненной должным образом средней длиной свободного пробега фононов $\langle \langle \Lambda_{ph} \rangle \rangle$ и средней скоростью фононов $\langle v_{ph} \rangle$, а именно

$$\kappa_L = \frac{1}{3} \langle \langle \Lambda_{ph} \rangle \rangle \langle v_{ph} \rangle C_V. \quad (30)$$

Энергия фононов на единицу объема, очевидно, дается выражением

$$E_{ph} = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) n_0(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (31)$$

где $D_{ph}(\hbar\omega)$ есть плотность фононных состояний. По определению,

$$\begin{aligned} C_V &\equiv \frac{\partial E_{ph}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) n_0(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \\ &= \int_0^{\infty} (\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) \left(\frac{\partial n_0(\hbar\omega)}{\partial T} \right) d(\hbar\omega) = \\ &= \frac{\pi^2 k^2 T}{3} \int_0^{\infty} D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \end{aligned} \quad (32)$$

где использовались уравнения (8) и (15).

Умножение и деление коэффициента теплопроводности (24) на теплоемкость (32) дает искомую пропорциональность

$$\kappa_L = \left[\frac{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^{\infty} D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \right] C_V \quad (33)$$

Для получения окончательного результата в виде уравнения (30) и корректной интерпретации коэффициента пропорциональности между κ_L и C_V нужно вернуться к связи между средней длиной свободного пробега и коэффициентом прохождения (19), имеющей одинаковый вид как для электронов, так и для фононов.

2.2.1 Средняя длина свободного пробега и коэффициент прохождения

Связь этих двух важнейших характеристик диффузионного транспорта проще всего проиллюстрировать на примере электронного транспорта по 1D проводнику в диффузионном режиме (рис. 7).

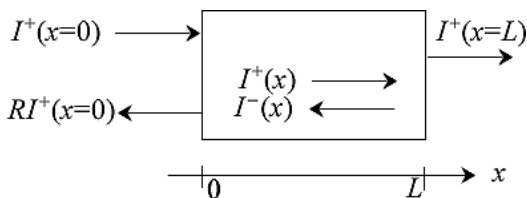


Рис. 7 – К выводу связи между коэффициентом прохождения и средней длиной свободного пробега на примере однородного 1D проводника.

Рассмотрим однородный 1D проводник в диффузионном режиме. Левый контакт впрыскивает электроны с током $I^+(x=0)$. Доля электронов T войдет в правый контакт с током $I^+(x=L) = T I^+(x=0)$. Оставшаяся доля вернется в левый контакт (рассеяние назад) с током $I^-(x=0) = R I^+(x=0)$. В отсутствие процессов рекомбинации $T + R = 1$. Предполагается также, что правый контакт идеальный, поглощает все входящие в него электроны. Результирующий ток, очевидно, будет $I = (1 - R) I^+(0) = T I^+(0)$. Так или иначе, в проводнике имеют место как прямые, так и обратные потоки электронов, и нам необходимо описать их пространственное распределение.

Определим обратное значение средней длины свободного пробега $1/\lambda$ как вероятность (на единицу длины) обращения положительного потока электронов в отрицательный и наоборот. Именно исходя из этого определения, величину λ и называют иногда средней длиной свободного обратного рассеяния (mean-free-pass for backscattering) или проще средней длиной свободного пробега. В диффузионном проводнике некоторая доля положительного потока в результате рассеяния назад обращается в отрицательный. В проводнике формируется отрицательный поток и его некоторая доля в результате рассеяния назад обращается, усиливая положительный поток. В результате градиент положительного тока складывается из двух величин

$$\frac{dI^+(x)}{dx} = -\frac{I^+(x)}{\lambda} + \frac{I^-(x)}{\lambda} \quad (34)$$

Пренебрегая процессами рекомбинации, результирующий ток

$$I = I^+(x) - I^-(x) \quad (35)$$

является постоянной величиной, так что градиент тока

$$\frac{dI^+(x)}{dx} = -\frac{I}{\lambda} \quad (36)$$

является константой. Другими словами, ток спадает линейно вдоль проводника

$$I^+(x) = I^+(0) - \frac{I}{\lambda} x \quad (37)$$

Воспользуемся полученным уравнением для

вычисления тока, входящего в правый контакт

$$\begin{aligned} I^+(L) &= I^+(0) - \frac{I}{\lambda} L = \\ &= I^+(0) - \left[I^+(L) - I^-(L) \right] \frac{L}{\lambda} = \\ &= I^+(0) - I^-(L) \frac{L}{\lambda}, \end{aligned} \quad (38)$$

где учтено уравнение баланса (35) и то, что правый контакт идеальный ($I^-(L) = 0$). Из последнего равенства находим

$$I^+(L) = \frac{\lambda}{\lambda + L} I^+(0) = T I^+(0). \quad (39)$$

Если провести аналогичные рассуждения для впрыскивания электронов правым контактом, то получим аналогичное уравнение для электронов, входящих в левый контакт, а именно: $I^-(0) = T' I^-(L)$. Для однородного проводника $T' = T$. Проводник под напряжением не является однородным, но нас интересует режим линейного отклика, так что вполне приемлемо положить $T' \approx T$. Окончательно, в предположении независимости друг от друга мод проводимости получаем искомое уравнение (19), связывающее коэффициент прохождения со средней длиной свободного пробега

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}. \quad (40)$$

Вывод уравнения (40) сделан в рамках простой модели, что никак не мешает успешному и широкому использованию его на практике. Важным моментом в проведенных рассуждениях является интерпретация $1/\lambda$ как вероятности (на единицу длины) обращения потока частиц в обратном направлении в результате рассеяния. Именно поэтому саму длину λ , как уже упоминалось, часто называют средней длиной свободного рассеяния назад.

Установим связь между λ и временем рассеяния τ . Пусть электрон совершает акт рассеяния в изотропном 1D проводнике. У него есть две возможности: рассеяться вперед и рассеяться назад. Только рассеяние назад существенно для определения средней длины свободного пробега. Отсюда следует, что средняя длина рассеяния назад равна удвоенному значению средней длины рассеяния

$$\lambda_{1D}(E) = 2\Lambda(E) = 2v(E)\tau(E). \quad (41)$$

Для проводника произвольной размерности средняя длина рассеяния назад дается выражением [14]

$$\lambda(E) = 2 \frac{\langle v_x^2 \tau \rangle}{\langle |v_x| \rangle}, \quad (42)$$

где усреднение для 2D и 3D проводников ведется по углам. Для изотропных проводников

$$\lambda_{2D}(E) = \frac{\pi}{2} v(E) \tau(E), \quad (43)$$

$$\lambda_{3D}(E) = \frac{4}{3} v(E) \tau(E). \quad (44)$$

Для времени рассеяния τ часто используется степенной закон

$$\tau(E) = \tau_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^s, \quad (45)$$

где значение показателя степени отражает тот или иной механизм рассеяния. Для акустических фононов в 3D проводниках с параболической дисперсией $s = -1/2$, для рассеяния на ионизированных примесях $s = +3/2$ [15].

Аналогичный степенной закон часто используется для средней длины рассеяния

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r. \quad (46)$$

Для параболической зонной структуры $v(E) \propto E^{1/2}$, так что $r = s + 1/2$. Для акустических фононов, соответственно, $r = 0$, а для рассеяния на ионизированных примесях $r = 2$.

Возвращаясь к нашей первоначальной задаче – выводу уравнения (30) из (33), для 3D проводника, согласно (44), имеем

$$\lambda_{ph}(\hbar\omega) = \frac{4}{3} v_{ph}(\hbar\omega) \tau_{ph}(\hbar\omega), \quad (47)$$

где, согласно (41),

$$v_{ph}(\hbar\omega) \tau_{ph}(\hbar\omega) = \Lambda_{ph}(\hbar\omega), \quad (48)$$

так что окончательно

$$\lambda_{ph}(\hbar\omega) = \frac{4}{3} \Lambda_{ph}(\hbar\omega). \quad (49)$$

2.2.2 Число фононных мод и плотность фононных состояний

Ранее было показано, что для 3D проводника число мод и плотность электронных состояний связаны соотношением (ф-ла (63) в [12])

$$M_{el}(E) = AM_{3D}(E) = A \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E). \quad (50)$$

Мы хотим эту формулу переписать применительно к фононам. Сначала вспомним, что спиновое вырождение $g_s = 2$ входит в плотность состояний, так что в пересчете на один спин

$$D_{3D}(E) = 2D'_{3D}(E). \quad (51)$$

Далее, для сферических зон в 3D

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{v_{el}(E)}{2}. \quad (52)$$

Сочетая (51) и (52) с (50) и переходя к фононам, получаем

$$M_{ph}(\hbar\omega) = A \frac{\hbar}{2} \left(\frac{v_{ph}(\hbar\omega)}{2} \right) 2D_{ph}(\hbar\omega) = A \frac{\hbar}{4} v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega). \quad (53)$$

Подставляя (49) и (53) в (33), получаем очередной промежуточный результат

$$\kappa_L = \left[\frac{\frac{1}{3} \int_0^\infty \Lambda_{ph}(\hbar\omega) v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \right] C_V. \quad (54)$$

Умножая и деля (54) на

$$\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (55)$$

окончательно получаем искомое уравнение (30) с коэффициентом пропорциональности между κ_L и C_V в виде произведения средней длины свободного пробега фононов

$$\langle \langle \Lambda_{ph} \rangle \rangle = \frac{\int_0^\infty \Lambda_{ph}(\hbar\omega) v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \quad (56)$$

и средней скорости фононов

$$\langle v_{ph} \rangle = \frac{\int_0^\infty v_{ph}(\hbar\omega) D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{\int_0^\infty D_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}, \quad (57)$$

усредненных должным образом.

Уравнение (30) часто используется для вычисления средней длины свободного пробега фононов из результатов измерений теплопроводности и теплоемкости. Для этого нужно знать среднюю скорость фононов, которая нередко предполагается равной продольной составляющей скорости звука. Приведенные выше выкладки точно определяют смысл усреднений при вычислении средней длины свободного пробега фононов и их средней скорости. Например, задавшись дисперсией фононов всегда можно вычислить их среднюю скорость по (57). Как правило, вычисленная таким образом скорость сильно отличается от продольной составляющей скорости звука, что далее ведет к ошибочным результатам по средней длине свободного пробега фононов [16].

2.3 Дебаевская модель

В случае электронов ширина зоны проводимости $BW \gg kT$, так что заняты только состояния вблизи дна зоны проводимости и поэтому так неплохо работает модель эффективной массы с параболической дисперсией (рис. 1). Со всем другая ситуация в случае фононов: $BW \approx kT$ (рис. 4). Заняты состояния по всей зоне Бриллюэна. Акустические моды тем лучше аппроксимируются дебаевским линейным приближением (2), чем ближе волновые числа к центру зоны Бриллюэна (рис. 3 и 4).

Перепишем (2) в виде

$$\hbar\omega = \hbar v_D q, \quad (58)$$

где под дебаевской скоростью v_D понимают среднюю скорость продольных и поперечных акустических мод. Тогда, по аналогии с электронами, плотность фононных состояний

$$D_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{2\pi^2 (\hbar v_D)^3}, \quad [Дж^{-1} \cdot м^{-3}], \quad (59)$$

где множитель 3 учитывает три поляризации акустических мод. Обратим внимание, что в учебниках плотность фононных состояний чаще

выражается в $\Gamma \text{ц}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}$

$$D_{ph}(\hbar\omega) = \frac{D_{ph}(\omega)}{\hbar}.$$

Число мод на единицу площади поперечного сечения проводника вычисляем по (53)

$$M_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{4\pi(\hbar v_D)^2}. \quad (60)$$

Поскольку все состояния в зоне Бриллюэна при умеренных температурах стремятся быть заполненными, нужно проконтролировать, что действительно учтены все состояния. В кристалле с N/Ω атомами на единицу объема имеем $3N/\Omega$ состояний на единицу объема. Полное число состояний дается интегралом

$$\int_0^{\hbar\omega_D} D_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (61)$$

в котором верхний предел, определяемый дебаевской частотой, выбирается таким образом, чтобы получить правильное число состояний $3N/\Omega$, а именно

$$\hbar\omega_D = \hbar v_D \left(\frac{6\pi^2 N}{\Omega} \right)^{1/3} \equiv kT_D. \quad (62)$$

Дебаевская частота является предельной, выше которой фононные состояния уже не существуют или не учитываются. Это ограничение можно ввести и через дебаевский волновой вектор q_D или через дебаевскую температуру T_D через (62). Для $T \ll T_D$ заняты только состояния с $q \rightarrow 0$, для которых хорошо выполняется дебаевское приближение.

Теперь интегрирование в (24) можно вести только до дебаевской энергии

$$\kappa_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \times \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega) \quad (63)$$

и брать число фононных мод по (60). Интеграл можно взять численно или аналитически с приемлемым выражением для средней длины свободного пробега фононов. Именно таким образом была впервые вычислена решеточная теплопроводность [17, 18]. Дальнейшее развитие теории и методы вычисления термоэлектрических

транспортных коэффициентов получили в работах [14, 16, 19].

2.4 Рассеяние фононов

Фононы рассеиваются на незаряженных дефектах, примесных атомах, изотопах, на других фононах, на поверхностях и границах, на электронах. Фонон-фононное рассеивание обязано тому, что потенциальная энергия колеблющегося атома в кристалле не совсем гармоническая. Все более высокие порядки учитываются в виде потенциала рассеяния. Рассматривают две возможности фонон-фононного взаимодействия. В обычном процессе два фонона взаимодействуя порождают третий фонон с сохранением импульса и энергии:

$$\begin{aligned} \hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 &= \hbar\vec{q}_3, \\ \hbar\vec{w}_1 + \hbar\vec{w}_2 &= \hbar\vec{w}_3. \end{aligned} \quad (64)$$

Поскольку суммарный импульс сохраняется, то такой процесс не может дать существенный вклад в перенос тепла.

В umklapp/U-процессах рассеяния суммарный импульс не сохраняется, генерируемый фонон характеризуется импульсом за пределами первой зоны Бриллюэна. Это может быть как ангармоничное фонон-фононное, так и электрон-фононное взаимодействие. U-рассеяние является основным процессом в переносе тепла, особенно при высоких температурах. Ощутимый вклад дают также рассеяние на дефектах/D и на границах/B. Скорости всех трех процессов складываются, так что

$$\frac{1}{\tau_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \quad (65)$$

или через соответствующие длины свободного пробега

$$\frac{1}{\lambda_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\lambda_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_B(\hbar\omega)}, \quad (66)$$

поскольку для 3D сферических дисперсий λ и τ связаны уравнением (47).

Для всех механизмов рассеяния предложены выражения для скоростей [20]. Например, при рассеянии на дефектах

$$\frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} \propto \omega^4, \quad (67)$$

что напоминает рэлеевское рассеяние света на частицах пыли в атмосфере; высокочастотные

фононы особенно чувствительны к рассеянию на малых дефектах. При рассеянии на границах и поверхностях

$$\frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \propto \frac{v_{ph}(\hbar\omega)}{L}, \quad (68)$$

где L – наименьшая протяженность образца. Сложнее с U -рассеянием. Обычно используется выражение

$$\frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} \propto T^3 \omega^2 e^{-T_D/bT}. \quad (69)$$

2.5 Температурная зависимость теплопроводности

Температурная зависимость решеточной теплопроводности κ_L кремния представлена на рис. 8. Согласно уравнению (26), κ_L пропорциональна числу фононных мод $\langle M_{ph} / A \rangle$ и среднему значению длины свободного пробега фононов $\langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle$.

Изменение теплопроводности с температурой качественно можно объяснить следующим образом. Из определения числа мод (25) можно показать, что при низких температурах

$$\langle M_{ph} \rangle \propto T^3, \quad (T \rightarrow 0) \quad (70)$$

быстрое увеличение числа заселенных мод с температурой вызывает рост теплопроводности.

Важную роль играет рассеяние на границах. По мере роста температуры все больше продуцируется коротковолновых фононов (большие значения q). Возрастает роль рассеяния таких фононов на дефектах.

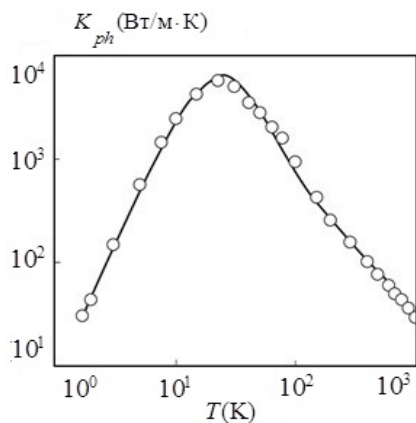


Рис. 8 – Температурная зависимость решеточной теплопроводности кремния: экспериментальные точки по [21], расчетная кривая по [16].

По мере приближения температуры к дебаевской заселяются все фононные моды и дальнейшее увеличение температуры уже не увеличивает числа мод. Более того, высокие температуры порождают U -процессы рассеяния и теплопроводность начинает падать.

2.6 Различие между решеточной теплопроводностью и электрической проводимостью

Уже подчеркивалось близкое подобие пары фононных транспортных уравнений (22) и (26) и пары электронных уравнений (28) и (29). Длины свободных пробегов электронов и фононов одного порядка. Почему же электрическая проводимость веществ меняется на много порядков, тогда как теплопроводность всего разнообразия веществ изменяется лишь на несколько порядков? Ответ кроется в различии между окнами проводимости для электронов (13) и фононов (15). Для тех и других рост температуры расширяет окна проводимости и тем самым увеличивает заселенность состояний. Для электронов, однако, все зависит от положения уровня Ферми, сдвигая который вверх или вниз можно менять проводимость на много порядков. Для фононов же ширина окна проводимости определяется только температурой.

Подчеркнем еще одно практически важное различие между описанием электронов и фононов, связанное с особенностями заселения состояний. В термоэлектрических устройствах $E_F \approx E_C$ и окна проводимости электронов и фононов схожи. У электронов, однако, ширина зон очень большая и лишь небольшое число состояний вблизи дна зоны проводимости заселено. Хорошо работает параболическая дисперсия и легко получить аналитические решения. В сопоставимой ситуации у фононов ширина зон незначительная, при повышенных температурах практически все состояния в зоне Бриллюэна заселены и простые аналитические модели для вычисления теплопроводности не работают.

2.7 Квантование теплопроводности

По аналогии с квантованием электронной проводимости

$$G^{ball} = \frac{2q^2}{h} M(E_F) \quad (71)$$

еще 30 лет назад Пендри [22] показал, что должны существовать квантовые ограничения на перенос тепла. Действительно, в уравнении (17) при $T \rightarrow 0$ окно фононной проводимости

$W_{ph}(\hbar\omega)$ стремится к δ -функции, так что в пределе

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} T_{ph}(0) M_{ph}(0). \quad (72)$$

Для массивных проводников $M_{ph}(\hbar\omega) \rightarrow 0$ при $\hbar\omega \rightarrow 0$, однако, для наноразмерных проводников всегда есть конечное число фононных мод. В случае баллистического транспорта $T_{ph} = 1$ и в этом случае можно ожидать что

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} M_{ph}. \quad (73)$$

Именно этот результат был подтвержден экспериментально на 4-хмодовом нанорезисторе при $T < 0.8 \text{ K}$ [13]; результаты измерений теплопроводности полностью согласуются с предсказаниями для одномерных баллистических резисторов [23 – 25].

Квант теплопроводности

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / 3h \quad (74)$$

есть максимальная энергия, переносимая в пересчете на одну фононную моду. Удивительно, что квант теплопроводности не зависит от статистики частиц, переносящих тепло, он универсален для фермионов, бозонов и любых анионов/аюнов [26 – 28].

Подведем итоги. В настоящем обзоре подчеркивается, что концепции, используемые для описания электронного транспорта, с успехом могут быть перенесены на фононный транспорт. И в том и в другом случае подход Ландауэра, обобщенный впоследствии Даттой и Лундстромом, позволяет количественно описать транспортные процессы в проводниках любой размерности и при любых режимах транспорта – от диффузионного до баллистического. Решеточная теплопроводность и электронная проводимость описываются очень схожими по форме уравнениями. Есть, однако, два существенных отличия, связанных с физикой электронных и фононных процессов.

Первое отличие касается ширины зон. В случае электронов ширина зон намного превышает kT и при комнатной температуре заселены лишь уровни вблизи дна зоны проводимости. Ширина фононных дисперсий всего лишь порядка kT и при комнатной температуре все акустические моды в пределах всей зоны Бриллюэна практически заселены. В результате дебаевская модель для акустических мод далеко не столь успешно работает по сравнению с широкой применимо-

стью параболической дисперсии для электронов.

Второе существенное различие связано с тем, что в случае электронов заселенность мод проводимости, контролируемая фермиевским окном проводимости, зависит не только от температуры, как это имеет место в случае фононов, но и от положения уровня Ферми. Именно по этой причине электронная проводимость различных материалов может изменяться в очень широких пределах, тогда как теплопроводность изменяется в очень узких пределах всего на несколько порядков.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012, 473 p. www.nanohub.org/courses/FoN1.
2. Lundstrom Mark, Jeong Changwook. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013, 227 p. www.nanohub.org/resources/11763.
3. Кругляк Ю. А. Уроки наноэлектроники. 4. Термоэлектрические явления в концепции «снизу – вверх» // Физическое образование в вузах. 2013. Т. 19. № 4. С. 70–85.
4. Кругляк Ю. А. Наноэлектроника «снизу - вверх». Одесса: ТЭС, 2015. 535 с.
5. Займан Дж. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах. М.: ИИЛ, 1962. 488 с.
6. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Высшая школа, 1974. 478 с.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела, тома 1 и 2. М.: Мир, 1979.
9. Mohr M., Maultzsch J., Dobardžić E., Reich S., Milošević I., Damnjanović M., Bosak A., Krisch M., Thomsen C. Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering. *Phys. Rev. B.*, 2007, vol. 76, no. 3, p. 035439/7.
10. Елецкий А. В., Искандарова И. М., Книжник А. А., Красиков Д. Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // УФН. 2011. Т. 181. С. 227–258.
11. Katsnelson M. I. *Graphene: Carbon in Two Dimensions*. New York: Cambridge University Press, 2012. 366 p.
12. Кругляк Ю. А. Обобщенная модель электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрорма // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. 2013. Т. 11, № 3. С. 519–549.
13. Schwab K., Henriksen E. A., Worlock J. M., Roukes M. L. Measurement of the quantum of thermal conductance. *Nature*, 2000, vol. 404, pp. 974–977.
14. Jeong C., Kim R., Luisier M., Datta S., Lundstrom M. On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients. *J.Appl.Phys.*, 2010, vol. 107, p. 023707.
15. Mark Lundstrom. *Fundamentals of Carrier Transport*. Cambridge UK: Cambridge University Press, 2012. 440 p.
16. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. Full Dispersion versus Debye Model Evaluation of Lattice Thermal Conductivity with a Landauer Approach. *J.Appl.Phys.*, 2011, vol. 109, p. 073718/8.

17. Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures. *Phys. Rev.*, 1959, vol. 11, no. 4, pp. 1046–1051.
18. Holland M. G. Analysis of lattice thermal conductivity. *Phys. Rev.*, 1963, vol. 132, no. 6, pp. 2461–2471.
19. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. . Thermal Conductivity of Bulk and Thin-Film Silicon: A Landauer Approach. *J. Appl. Phys.*, 2012, vol. 111, p. 093708.
20. Gang Chen. *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons*. New York: Oxford University Press: 2005, p. 560.
21. Glassbrenner C. J., Slack G. A. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3° K to the Melting Point. *Phys. Rev.*, 1964, vol. 134, no. 4A, p. A1058.
22. Pendry J. B. Quantum limits to the flow of information and entropy. *J. Phys. A.*, 1983, vol. 16, p. 2161–2171.
23. Angelescu D. E., Cross M. C., Roukes M. L. Heat transport in mesoscopic systems. *Superlatt. Microstruct.*, 1998, vol. 23, pp. 673–689.
24. Rego L.G.C., Kirczenow G.. Quantized thermal conductance of dielectric quantum wires. *Phys.Rev.Lett.*, 1998, vol. 81, pp. 232–235.
25. Blencowe M. P. Quantum energy flow in mesoscopic dielectric Structures. *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 59, pp. 4992–4998.
26. Rego L.G.C., Kirczenow G. Fractional exclusion statistics and the universal quantum of thermal conductance: A unifying approach. *Phys.Rev. B.*, 1999, vol. 59, pp. 13080–13086.
27. Krive I. V., Mucciolo E. R. . Transport properties of quasiparticles with fractional exclusion statistics. *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 60, pp. 1429 - 1432.
28. Caves C. M., Drummond P. D. Quantum limits on bosonic communication rates. *Rev.Mod.Phys.*, 1994, vol. 66, pp. 481–537.
- sen C. Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering. *Phys. Rev. B.*, 2007, vol. 76, no. 3, p. 035439/7.
10. Eletskiy A. V., Iskandarova I. M., Knizhnik A. A., Krasikov D. N. *UFN – Successes of physical sciences*, 2011, vol. 181, pp. 227–258. (In Russian)
11. Katsnelson M. I. *Graphene: Carbon in Two Dimensions*. New York: Cambridge University Press, 2012. 366 p.
12. Kruglyak Yu. A., *Nanosystemy, nanomaterialy, nanotekhnologii — Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies*, 2013, vol. 11, №3, pp. 519–549. (In Russian).
13. Schwab K., Henriksen E. A., Worlock J. M., Roukes M. L. Measurement of the quantum of thermal conductance. *Nature*, 2000, vol. 404, pp. 974–977.
14. Jeong C., Kim R., Luisier M., Datta S., Lundstrom M. On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients. *J.Appl.Phys.*, 2010, vol. 107, p. 023707.
15. Mark Lundstrom. *Fundamentals of Carrier Transport*. Cambridge UK: Cambridge University Press, 2012. 440 p.
16. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. Full Dispersion versus Debye Model Evaluation of Lattice Thermal Conductivity with a Landauer Approach. *J.Appl.Phys.*, 2011, vol. 109, p. 073718/8.
17. Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures. *Phys. Rev.*, 1959, vol. 11, no. 4, pp. 1046–1051.
18. Holland M. G. Analysis of lattice thermal conductivity. *Phys. Rev.*, 1963, vol. 132, no. 6, pp. 2461–2471.
19. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. . Thermal Conductivity of Bulk and Thin-Film Silicon: A Landauer Approach. *J. Appl. Phys.*, 2012, vol. 111, p. 093708.
20. Gang Chen. *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons*. New York: Oxford University Press: 2005, p. 560.
21. Glassbrenner C. J., Slack G. A. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3° K to the Melting Point. *Phys. Rev.*, 1964, vol. 134, no. 4A, p. A1058.
22. Pendry J. B. Quantum limits to the flow of information and entropy. *J. Phys. A.*, 1983, vol. 16, p. 2161–2171.
23. Angelescu D. E., Cross M. C., Roukes M. L. Heat transport in mesoscopic systems. *Superlatt. Microstruct.*, 1998, vol. 23, pp. 673–689.
24. Rego L.G.C., Kirczenow G.. Quantized thermal conductance of dielectric quantum wires. *Phys.Rev.Lett.*, 1998, vol. 81, pp. 232–235.
25. Blencowe M. P. Quantum energy flow in mesoscopic dielectric Structures. *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 59, pp. 4992–4998.
26. Rego L.G.C., Kirczenow G. Fractional exclusion statistics and the universal quantum of thermal conductance: A unifying approach. *Phys.Rev. B.*, 1999, vol. 59, pp. 13080–13086.
27. Krive I. V., Mucciolo E. R. . Transport properties of quasiparticles with fractional exclusion statistics. *Phys. Rev. B.*, 1999, vol. 60, pp. 1429 - 1432.
28. Caves C. M., Drummond P. D. Quantum limits on bosonic communication rates. *Rev.Mod.Phys.*, 1994, vol. 66, pp. 481–537.

REFERENCES

1. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012, 473 p. www.nanohub.org/courses/FoN1.
2. Lundstrom Mark, Jeong Changwook. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013, 227 p. www.nanohub.org/resources/11763.
3. Kruglyak Yu. A. *Fizicheskoe obrazovanie v vuzakh – Physical education in Universities*, 2013, vol. 19, no. 4, pp. 70 – 85. (In Russian).
4. Kruglyak Yu. A. *Nanoelektronika «znyzu - vverkh»* [Nanoelectronics “bottom-up”]. Odessa: TES, 2015.
5. Zayman Dzh. *Elektrony i fonony. Teoriya yavleniy perenosy v tverdykh telakh* [Electrons and phonons. The theory of transport phenomena in solids]. Moscow: IIL, 1962. 488 p.
6. Zayman Dzh. *Printsipy teorii tverdogo tela* [Principles of solid state theory]. Moscow: Vysshaya shkola, 1974.
7. Kittel' Ch. *Vvedenie v fiziku tverdogo tela* [Introduction to Solid State Physics]. Moscow: Nauka, 1978.
8. Ashcroft N., Mermin N. *Fizika tverdogo tela, toma 1 i 2* [Solid State Physics vol. 1 and 2]. Moscow: Mir, 1979.
9. Mohr M., Maultzsch J., Dobardžić E., Reich S., Milošević I., Damjanović M., Bosak A., Krisch M., Thom-

ПЕРЕНОСЕННЯ ТЕПЛА ФОНОНАМИ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ ТРАНСПОРТНІЙ МОДЕЛІ

Ю. О. Кругляк, проф.,
Н. З. Штефан, асис.

*Одеський державний екологічний університет,
вул. Львівська, 15, 65016, Одеса, Україна, amalon.7@gmail.com*

З позицій транспортної моделі Ландауера – Датти – Лундстрома будується узагальнена модель переносу тепла фононами. Аналогічно фермієвському вікну електронної провідності вводиться поняття фермієвського вікна фононної провідності і через нього виводиться загальний вираз для ґраткової теплопровідності, в якому з самого початку фігурує квант теплопровідності. Підкреслюються подібності і відмінності в побудові теорії електронної провідності і теорії теплопровідності. Докладно розглядається теплопровідність і провідників, розкривається фізичний зміст пропорційності між питомою теплопровідністю і питомою теплоємністю при постійному об'ємі, виводиться зв'язок між коефіцієнтом проходження і середньою довжиною вільного пробігу, обговорюються обчислення числа фононних мод і густини фононних станів, особливості дебаєвської моделі теплопровідності і розсіювання фононів, температурна залежність ґраткової теплопровідності, відмінність між ґратковою теплопровідністю і електронною провідністю і квантування теплопровідності.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, дифузійно-дрейфова модель, струм насичення, роль контактів.

HEAT TRANSFER BY PHONONS IN THE GENERALIZED TRANSPORT MODEL

Kruglyak Yu. A., Prof.
Shtefan N. Z., TF

*Odessa State Environmental University,
Lvivska str., 15, 65016, Odessa, Ukraine, amalon.7@gmail.com*

On the basis of Landauer – Datta – Lundstrom transport model the generalized model of heat transfer by phonons is formulated. Similarly to the Fermi window for electron conductivity the concept of the Fermi window for phonon conductivity is introduced and used to obtain the general expression for the lattice thermal conductivity with the quantum of thermoconductance appearing at the very beginning. There are emphasized the similarity and differences in the construction of the theory of electron conductivity and the theory of heat conduction. There are discussed the thermal conductivity of the conductors, the physical sense of proportionality between the thermal conductivity and specific heat capacity at constant volume, the relationship between the transmission coefficient and the mean-free-path, the calculation of the number of phonon modes and density of phonon states, the Debye model of heat conductivity and scattering of phonons, the temperature dependence of the lattice thermal conductivity, the difference between the lattice thermal conductivity and electron conduction, and quantization of thermal conductivity.

In the present review it is emphasized that the concepts used to describe the electron transport can be successfully transferred to the phonon transport. And in both cases the Landauer approach, generalized subsequently by Datta and Lundstrom, allows a quantitative description of transport processes in conductors of any dimension and in all modes of transport from diffusive to ballistic. Lattice thermal conductivity and electronic conductivity are described very similar as far as the shape of corresponding equations. There are, however, two significant differences related to the physics of electron and phonon processes which are also emphasized in the review.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, phonon transport, quantum thermal conductivity, transmission coefficient, phonon modes, Debye model, phonon scattering.

*Дата першого подання: 16. 11. 2016
Дата надходження остаточної версії: 16. 05. 2017
Дата публікації статті: 30. 11. 2017*