

PACSnumbers: 63.22.-m, 65.80.-g, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 73.50.Lw, 74.25.fg, 84.60.Rb, 85.80.Fi

## **Транспорт тепла фононами в моделі Ландауэра–Датты–Лундстрома**

Ю. А. Кругляк

*Одесский государственный экологический университет,  
ул. Львовская, 15,  
65016 Одесса, Украина*

С позиций транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрома строится обобщённая модель переноса тепла фононами. Аналогично фермиевскому окну электронной проводимости вводится понятие фермиевского окна фононной проводимости и через него выводится общее выражение для решёточной теплопроводности, в котором с самого начала фигурирует квант теплопроводности. Подчёркиваются подобие и различия в построении теории электронной проводимости и теории теплопроводности. Подробно рассматривается теплопроводность проводников, вскрывается физический смысл пропорциональности между удельной теплопроводностью и удельной теплоёмкостью при постоянном объёме, 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 решёточной теплопроводности, различие между решёточной теплопроводностью и электронной проводимостью и квантование теплопроводности.

З позиций транспортного моделию Ландауэра–Датты–Лундстрома будується узагальнений модель перенесення тепла фононами. Аналогічно Фермієвому вікню електронної провідності вводиться поняття Фермієвого вікна фононної провідності і через нього виводиться загальний вираз для ґратничевої теплопровідності, в якому з самого початку фігурує квант теплопровідності. Підкреслюються подібність і відмінності в побудові теорії електронної провідності і теорії теплопровідності. Докладно розглядається теплопровідність 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 обчис-

лення числа фононних мод і густини фононних станів, особливості Дебайового моделю теплопровідності і розсіяння фононів, температурна залежність ґратничевої теплопровідності, відмінність ґратничевої теплопровідності від електронної провідності і квантування теплопровідності.

Based on the 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 thermal conductance 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 the 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.

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

**Ключові слова:** нанофізика, наноелектроніка, фононний транспорт, квант теплопровідності, коефіцієнт проходження, фононні моди, Дебайв модель, розсіяння фононів.

**Key words:** nanophysics, nanoelectronics, phonon transport, thermal conduction quantum, passage coefficient, phonon modes, Debye model, scattering of phonons.

*(Получено 18 марта 2015 г.)*

## 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  $x$ )

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

где коэффициентом пропорциональности потока тепла градиенту

температуры является удельная решёточная теплопроводность  $k_L$ . У алмаза, одного из лучших проводников тепла,  $k_L \approx 2000$  Вт/(м·К), у такого плохого проводника тепла как стекло  $k_L \approx 1$  Вт/(м·К), а у воздуха  $k_L \approx 0,025$  Вт/(м·К). Если электрическая проводимость твёрдых материалов меняется на 20 и больше порядков, то их решёточная теплопроводность изменяется всего на 3–4 порядка. Тем не менее, есть много общего в описании переноса тепла электронами и фононами в рамках транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма (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

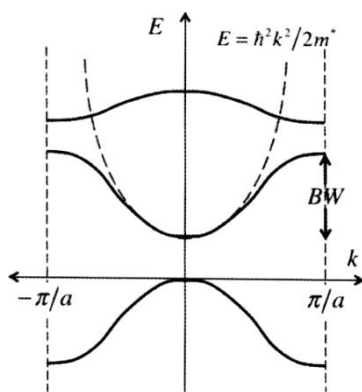


Рис. 1. Упрощённая зонная структура. Ширина зоны проводимости помечена как BW (Band Width). Часто используемая параболическая дисперсия показана пунктиром.<sup>1</sup>

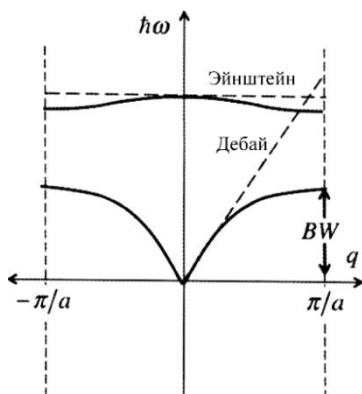


Рис. 2. Упрощённый ход дисперсии для фононов. Пунктиром показаны простейшие модели Эйнштейна и Дебая.<sup>2</sup>

дисперсии  $\hbar\omega(q)$  для фононов — на рис. 2.

Кристаллическая решётка периодична в реальном пространстве, а дисперсия — в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Аналогично для фононов: только в  $\mathbf{q}$ -пространстве. В обоих случаях решения реализуются в зоне Бриллюэна и ширины обеих зон конечны.

Для кристаллических 3D-проводников при распространении колебаний по решётке 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). В нулевом пределе волновых чисел ( $q \rightarrow 0$ ) у акустических мод дисперсия линейная. Для продольной акустической моды LA

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

с

$$v_s = \sqrt{\frac{k_{elas}}{m_{eff}}}, \quad (26)$$

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

На рисунке 3 показаны также три оптические моды. Дисперсия этих мод незначительна: частота оптических мод  $L$  и  $T$  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 относительно 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 расчётов методами теории функционала плотности [9–11].

В элементарной ячейке графена два атома углерода, что обуславливает наличие в спектре дисперсии графена шести фонон-

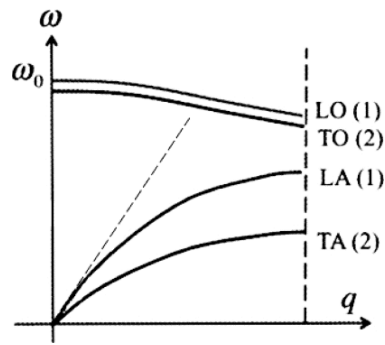


Рис. 3. Дисперсионные кривые для фононов.<sup>3</sup>

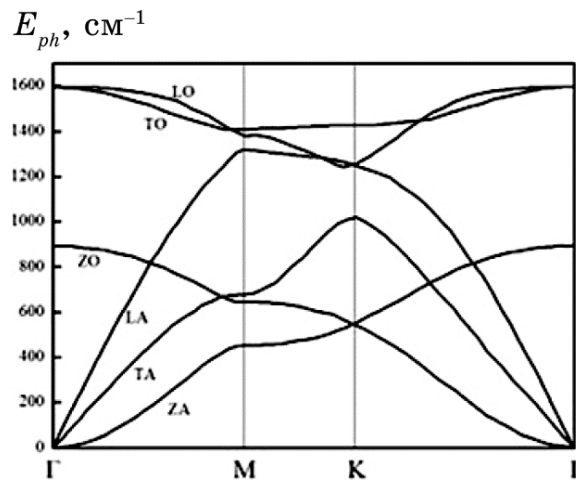


Рис. 4. Фононный спектр графена, опирающийся на совокупные экспериментальные и расчётные данные.<sup>4</sup>

ных ветвей — трёх оптических (LO, TO, ZO) и трёх 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) — колебаниям атомов углерода в направлении, перпендикулярном направлению колебаний мод LA и TA, с выходом атомов из плоскости графена. Моды LA и TA характеризуются линейной дисперсией; соответствующие этим модам скорости звука составляют 21300 и 13600 м/с соответственно. Все теплофизические свойства графена (теплопроводность, тепло-

ёмкость и др.) определяются фононами.

## 2. ОБОБЩЁННАЯ МОДЕЛЬ ЛДЛ ПЕРЕНОСА ТЕПЛА ФОНОНАМИ

Электрический ток в обобщённой транспортной модели ЛДЛ [3, 4, 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 электроном всей длины 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 считаются достаточно массивными 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 фононов 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 энергией фононов  $\hbar\omega$ . В случае электронов переносятся заряды  $q$ , а в случае фононов — кванты энергии  $\hbar\omega$ : заменим  $q$  на  $\hbar\omega$  и внесём  $\hbar\omega$  под знак интеграла. Двойка в уравнении (3) для тока электронов соответствует вырождению по спину. Исключим её из уравнения для фононов, а число состояний поляризации фононов включим в число фононных мод  $M_{ph}(\hbar\omega)$ . Окончательно для тепла, переносимого фононами, имеем:

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

Как и в случае электронов, нас интересует режим линейного отклика, или иначе квазиравновесного 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 дифференцированием 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 решёточная 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

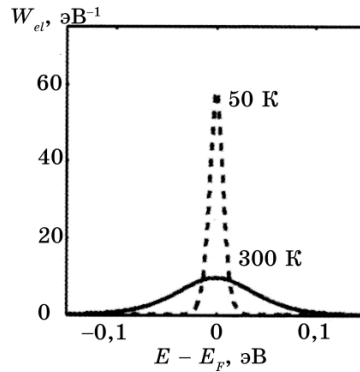
моды проводника, которые только и могут внести вклад в электронную проводимость. Окно проводимости нормировано на 1:

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

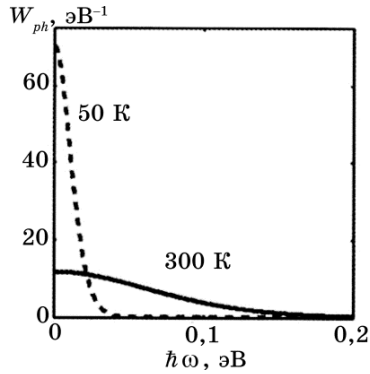
Аналогичную роль окна проводимости для фононов играет следующее выражение:

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

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



**Рис. 5.** Окно проводимости для электронов (13) при двух разных температурах. Энергия  $E$  может быть как больше фермиевской, так и меньше её.<sup>5</sup>



**Рис. 6.** Окно проводимости для фононов (15) при двух разных температурах. Энергия фононов может быть только положительной.<sup>6</sup>



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

так что окончательно решёточная теплопроводность

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

В этом выражении численный коэффициент

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / (3h) \approx (9,456 \cdot 10^{-13} \text{ Вт/К}^2) T, \quad (18)$$

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

Сравнивая выражения для решёточной теплопроводности (17) и электронной проводимости (12), опять убеждаемся в их схожести: и та и другая проводимости пропорциональны соответствующему кванту проводимости, умноженному на интеграл от произведения трёх величин — коэффициента прохождения, числа мод и окна проводимости. Профили окон проводимости для электронов и фононов показаны на рис. 5 и 6. Окна проводимости для электронов и фононов не только схожи, но и имеют приблизительно одинаковую ширину в  $\approx \pm 2kT$ .

## 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  $\lambda_{ph}(\hbar\omega)$  — длина свободного пробега фонона частоты  $\omega$ . Кроме того, число фононных мод пропорционально площади поперечного сечения 3D-проводника:

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

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

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

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

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

с удельной решёточной теплопроводностью

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

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

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

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

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

где усреднённое значение средней 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 [3, 4, 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 и тепла, 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 усреднённое значение средней длины свободного пробега соответствующего носителя (тока или тепла). К оценке этих трёх величин для фононов мы вернёмся позже.

## 2.2. УДЕЛЬНАЯ ТЕПЛОЁМКОСТЬ

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

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

Энергия фононов на единицу объёма, очевидно, даётся 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 теплоёмкость (32) даёт искомую пропорциональность:

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

Для получения окончательного результата в виде уравнения (30) и корректной интерпретации коэффициента пропорциональности между  $k_L$  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.

### 2.3. 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).

Рассмотрим однородный  $1D$ -проводник в диффузионном режиме. Левый контакт впрыскивает электроны с током  $I^+(x=0)$ . Доля электронов  $T$  войдёт в правый контакт с током  $I^+(x=L) = TI^+(x=0)$ . Оставшаяся доля вернётся в левый контакт (рассеяние назад) с током  $I^-(x=0) = RI^+(x=0)$ . В отсутствие процессов рекомбинации  $T + R = 1$ . Предполагается также, что правый контакт идеальный, поглощает все входящие в него электроны. Результирующий ток, очевидно, будет  $I = (1 - R)I^+(0) = TI^+(0)$ . 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  $\lambda$  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 некото-

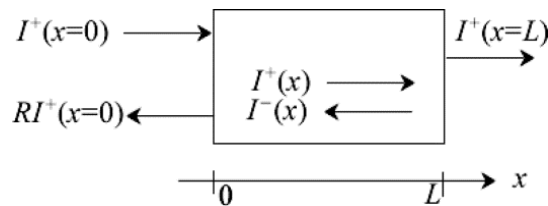


Рис. 7. К выводу связи между коэффициентом прохождения и средней длиной свободного пробега на примере однородного  $1D$ -проводника.<sup>7</sup>

рая 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:

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

где мы воспользовались уравнением баланса (35) и тем, 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 проведённых рассуждениях является интерпретация  $1/\lambda$  как вероятности (на единицу длины) обращения потока частиц в обратном направлении в результате рассеяния. Именно поэтому саму длину  $\lambda$ , как уже упоминалось, часто называют средней длиной свободного рассеяния назад.

Установим связь между  $\lambda$  и временем рассеяния  $\tau$ . Пусть электрон совершает акт рассеяния в изотропном  $1D$ -проводнике. У него есть две возможности: рассеяться вперёд 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 даётся выражением [14]

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

где усреднение для  $2D$ - и  $3D$ -проводников ведётся 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  $\tau$  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

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

#### 2.4. ПЛОТНОСТЬ ФОНОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ФОНОННЫЕ МОДЫ

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 пересчёте 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:

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

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  $k_L$  и  $C_V$  в виде произведения средней длины свободного пробега фононов

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

и средней скорости фононов

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

усреднённых должным образом.

Уравнение (30) часто используется для вычисления средней длины свободного пробега фононов из результатов измерений теплопроводности и теплоёмкости. Для этого нужно знать среднюю скорость фононов, которая нередко предполагается равной продольной составляющей скорости звука. Приведённые выше вклады 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 ведёт к ошибочным результатам по средней длине свободного пробега фононов [16].

Рассмотрим плотность фононных состояний и число фононных мод с более общих позиций. Плотность состояний фононов определяется аналогично плотности состояний электронов, как число



разрешённых фононных состояний на единицу энергии и единицу длины  $L$  для  $1D$ -проводников, площади поперечного сечения  $A$  для  $2D$ -проводников и на единицу объёма  $\Omega$   $LA$  для  $3D$ -проводников.

В случае электронов число разрешённых состояний со значением импульса, меньшим, чем заданное значение  $p$ , для проводников размерности  $d = \{1, 2, 3\}$  [17] —

$$N(p) = \left\{ 2 \frac{L}{h/p}, \quad \pi \frac{LW}{(h/p)^2}, \quad \frac{4\pi}{3} \frac{LA}{(h/p)^3} \right\}. \quad (58)$$

Аналогично, число разрешённых фононных состояний со значением волнового вектора  $k = p/\hbar$  меньшим, чем заданное значение  $k$ ,

$$N_{1D}(k) = \frac{2k}{2\pi/L}, \quad (59a)$$

$$N_{2D}(k) = \frac{\pi k^2}{4\pi^2/L^2}, \quad (59б)$$

$$N_{3D}(k) = \frac{4\pi k^3/3}{8\pi^3/L^3}, \quad (59в)$$

где единообразия ради далее удобно площадь  $2D$ -проводника обозначить как  $L^2 \equiv LW$ , а объём для  $3D$ -проводника как  $L^3 \equiv \Omega = LA$ . Величину  $L^d$  условно назовём «объёмом» проводника размерности  $d$ .

Плотность фононных состояний, согласно определению выше, очевидно, такова:

$$D_{1D}(k) = \frac{1}{L} \frac{dN_{1D}(k)}{dk} = \frac{1}{\pi}, \quad (60a)$$

$$D_{2D}(k) = \frac{1}{L^2} \frac{dN_{2D}(k)}{dk} = \frac{k}{2\pi}, \quad (60б)$$

$$D_{3D}(k) = \frac{1}{L^3} \frac{dN_{3D}(k)}{dk} = \frac{k^2}{2\pi^2}. \quad (60в)$$

Плотность фононных состояний часто выражают через групповую скорость фононов

$$v_g(\omega) = \frac{d\omega}{dk}, \quad (61)$$

а именно [18]:

$$D_{1D}(\omega) = \frac{1}{L} \frac{dN_{1D}(k)}{d\omega} = \frac{1}{L} \frac{dN_{1D}(k)}{dk} \frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{\pi v_g(\omega)}, \quad (62a)$$

$$D_{2D}(\omega) = \frac{1}{L^2} \frac{dN_{2D}(k)}{d\omega} = \frac{1}{L^2} \frac{dN_{2D}(k)}{dk} \frac{dk}{d\omega} = \frac{k(\omega)}{2\pi v_g(\omega)}, \quad (62б)$$

$$D_{3D}(\omega) = \frac{1}{L^3} \frac{dN_{3D}(k)}{d\omega} = \frac{1}{L^3} \frac{dN_{3D}(k)}{dk} \frac{dk}{d\omega} = \frac{k^2(\omega)}{2\pi^2 v_g(\omega)}. \quad (62в)$$

Количество тепла, переносимого фононами, определяется выражением (5), в котором число состояний поляризации фононов учтено в числе фононных мод  $M_{ph}(\hbar\omega)$ . Перепишем это выражение через интеграл по частоте:

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} (\hbar\omega) T_{ph}(\omega) M_{ph}(\omega) (n_1 - n_2) d\omega. \quad (63)$$

При переносе тепла по 1D-проводнику  $M_{ph}(\omega)$  есть просто единица, по 2D-проводнику  $M_{ph}(\omega)$  пропорционально ширине проводника, а по 3D-проводнику — площади его поперечного сечения:

$$M_{ph}(\omega) = \{M_{1D}(\omega), WM_{2D}(\omega), AM_{3D}(\omega)\}. \quad (64)$$

Для вычисления и интерпретации  $M_{2D}(\omega)$  и  $M_{3D}(\omega)$  нам потребуются соответствующие выражения для потоков тепла

$$J_{Qx}^{ph} = \{J_Q^{ph}(1D), J_Q^{ph}(2D), J_Q^{ph}(3D)\} = \{Q, Q/W, Q/A\}, \quad (65)$$

связанных непосредственно с количеством переносимого тепла (33), а именно [18]:

$$J_Q^{ph}(1D) = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) T_{ph}(\omega) \left[ \frac{1}{2} v_g(\omega) D_{1D}(\omega) \right] (n_1 - n_2) d\omega, \quad (66a)$$

$$J_Q^{ph}(2D) = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) T_{ph}(\omega) \left[ \frac{1}{2} \frac{2v_g(\omega)}{\pi} D_{2D}(\omega) \right] (n_1 - n_2) d\omega, \quad (66б)$$

$$J_Q^{ph}(3D) = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) T_{ph}(\omega) \left[ \frac{1}{2} \frac{v_g(\omega)}{2} D_{3D}(\omega) \right] (n_1 - n_2) d\omega, \quad (66в)$$

где плотности фононных состояний определяются уравнениями (62). Уравнивая потоки тепла (66) с количеством перенесённого тепла (63) согласно (65) и учитывая выражения для плотности фононных состояний (62), окончательно получаем:

$$M_{1D}(\omega) = \pi \left[ v_g(\omega) \right] D_{1D}(\omega) = 1, \quad (67a)$$

$$M_{2D}(\omega) = \pi \left[ \frac{2v_g(\omega)}{\pi} \right] D_{2D}(\omega) = \frac{k(\omega)}{\pi}, \quad (67б)$$

$$M_{3D}(\omega) = \pi \left[ \frac{v_g(\omega)}{2} \right] D_{3D}(\omega) = \frac{k^2(\omega)}{4\pi}, \quad (67в)$$

или иначе число фононных мод (64), определяющих количество перенесённого тепла (63),

$$M_{ph}(\omega) = \left\{ \begin{array}{l} M_{1D}(\omega) = \pi \left[ v_g(\omega) \right] \frac{1}{\pi v_g(\omega)} = 1, \\ WM_{2D}(\omega) = W \pi \left[ \frac{2v_g(\omega)}{\pi} \right] \frac{k(\omega)}{2\pi v_g(\omega)}, \\ AM_{3D}(\omega) = A \pi \left[ \frac{v_g(\omega)}{2} \right] \frac{k^2(\omega)}{2\pi^2 v_g(\omega)} \end{array} \right\} \quad (68)$$

что позволяет интерпретировать число мод  $M_{ph}(\omega)$  как максимальное число де-бройлевских полуволн, укладывающихся в «сечении» проводника, поперечном относительно направления движения фононов. Действительно, предполагая линейную зависимость  $\omega(k)$ , что вполне обосновано для ЛА и ТА акустических мод, имеем  $k = 2\pi / \lambda$ , так что уравнения (68) сводятся к

$$M_{ph}(\omega) = \left\{ \begin{array}{l} M_{1D}(\omega) = 1, \\ WM_{2D}(\omega) = W / (\lambda / 2), \\ AM_{3D}(\omega) = A / [(4 / \pi)(\lambda / 2)^2], \end{array} \right\} \quad (69)$$

где множитель  $4/\pi$  появляется в связи с тем, что поперечное сечение 3D-проводника предполагается круговым с площадью  $A$ , равной квадрату диаметра окружности, делённому на  $4/\pi$ . Обратим также внимание на то, что выражения в квадратных скобках уравнений (68) есть не что иное, как усреднённые по всем угловым переменным значения скорости фононов в направлении их движения (вдоль оси  $+x$  в нашем рассмотрении) [19].

## 2.5. 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 пара-

большой дисперсией (рис. 1). Совсем другая ситуация в случае фононов:  $BW \approx kT$  (рис. 2). 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

$$\hbar\omega = \hbar v_D q, \quad (70)$$

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

$$D_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{2\pi^2(\hbar v_D)^3} [\text{Дж}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}], \quad (71)$$

где множитель 3 учитывает три поляризации акустических мод. Обратим внимание, что в учебниках плотность фононных состояний чаще выражается в  $\text{Гц}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}$ :

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

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

$$M_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{4\pi(\hbar v_D)^2}. \quad (72)$$

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

$$\int_0^{\hbar\omega_D} D_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (73)$$

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

$$\hbar\omega_D = \hbar v_D \left( \frac{6\pi^2 N}{\Omega} \right)^{1/3} \equiv kT_D. \quad (74)$$

Дебаевская частота является предельной, выше которой фо-

нонные состояния уже не существуют или не учитываются. Это ограничение можно ввести и через дебаевский волновой вектор  $q_D$  или через дебаевскую температуру  $T_D$  посредством (74). 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:

$$k_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{M_{ph}(\hbar\omega)}{A} \lambda_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) d(\hbar\omega) \quad (75)$$

и брать число фононных мод по (72). Интеграл можно взять численно или аналитически с приемлемым выражением для средней длины свободного пробега фононов. Именно так была впервые вычислена решёточная теплопроводность [20, 21]. Дальнейшее развитие теории и методы вычисления термоэлектрических транспортных коэффициентов получили в работах [14, 16, 22].

### 3. 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:

$$\hbar\mathbf{q}_1 + \hbar\mathbf{q}_2 = \hbar\mathbf{q}_3, \quad \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3. \quad (76)$$

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 ангармоническое фонон-фононное, так и электрон-фононное взаимодействия.  $U$ -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 трёх процессов складываются, так что

$$\frac{1}{\tau_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \quad (77)$$

или через соответствующие длины свободного пробега

$$\frac{1}{\lambda_{ph}(\hbar\omega)} = \frac{1}{\lambda_U(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_D(\hbar\omega)} + \frac{1}{\lambda_B(\hbar\omega)}, \quad (78)$$

поскольку для 3D-сферических дисперсий  $\lambda$  и  $\tau$  связаны уравнением (47).

Для всех механизмов рассеяния предложены выражения для скоростей [23]. Например, при рассеянии на дефектах

$$\frac{1}{\tau_D(\hbar\omega)} \propto \omega^4, \quad (79)$$

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

$$\frac{1}{\tau_B(\hbar\omega)} \propto \frac{v_{ph}(\hbar\omega)}{L}, \quad (80)$$

где  $L$  — наименьшая протяжённость образца. Сложнее с  $U$ -рассеянием. Обычно используется выражение

$$\frac{1}{\tau_U(\hbar\omega)} \propto T^3 \omega^2 e^{-T_D/bT}. \quad (81)$$

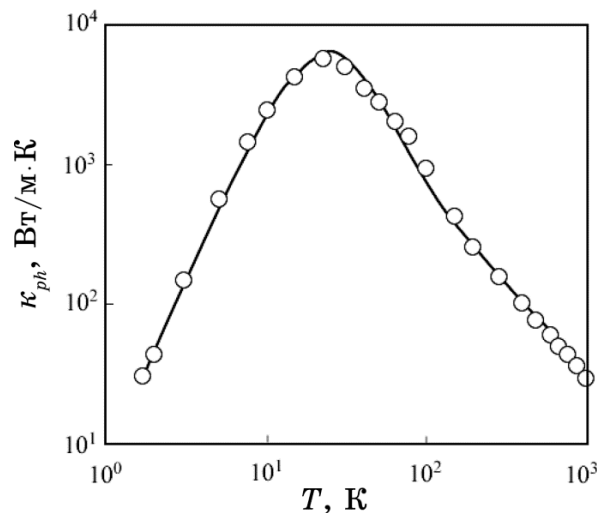
#### 4. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Температурная зависимость решёточной теплопроводности  $k_L$  кремния представлена на рис. 8. Согласно уравнению (26),  $k_L$  пропорциональна числу фононных мод  $\langle M_{ph} / A \rangle$  и усреднённому значению средней 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

$$\langle M_{ph} \rangle \propto T^3 \quad (T \rightarrow 0 \text{ К}); \quad (82)$$

быстрое увеличение числа заселённых 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. По мере приближения температуры к дебаевской заселяются все фононные моды, и



**Рис. 8.** Температурная зависимость решёточной теплопроводности кремния: экспериментальные точки по [24], расчётная кривая по [16].<sup>8</sup>

дальнейшее увеличение температуры уже не увеличивает числа мод. Более того, высокие температуры порождают *U*-процессы рассеяния, и теплопроводность начинает падать.

### 5. РАЗЛИЧИЕ МЕЖДУ РЕШЁТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬЮ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ

Уже подчёркивалось 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 заселённость 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.

Подчеркнём ещё 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.

## 6. КВАНТОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

По аналогии с квантованием электронной проводимости

$$G^{ball} = \frac{2q^2}{h} M(E_F) \quad (83)$$

ещё 30 лет назад Пендри [25] показал, что должны существовать квантовые ограничения на перенос тепла. Действительно, в уравнении (17) при  $T \rightarrow 0$  К окно фононной проводимости  $W_{ph}(\hbar\omega)$  стремится к  $\delta$ -функции, так что в пределе

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} T_{ph}(0) M_{ph}(0). \quad (84)$$

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

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} M_{ph}. \quad (85)$$

Именно этот результат был подтверждён экспериментально на 4-модовом нанорезисторе при  $T < 0,8$  К [13]; результаты измерений теплопроводности полностью согласуются с предсказаниями для одномерных баллистических резисторов [26–28].

Квант теплопроводности

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / (3h) \quad (86)$$

есть максимальная энергия, переносимая в пересчёте на одну фононную моду. Удивительно, что квант теплопроводности не зависит от статистики частиц, переносящих тепло, он универсален для фермионов, бозонов и любых энионов (anyons) [29–31].

Подведём итоги. В настоящем обзоре подчёркивается, что концепции, используемые для описания электронного транспорта, с успехом могут быть перенесены на фононный транспорт. И в том и в другом случае подход Ландауэра, обобщённый впоследствии



Даттой и Лундстромом, позволяет количественно описать транспортные процессы в проводниках любой размерности и при любых режимах транспорта — от диффузионного до баллистического. Решёточная 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 применимостью параболической дисперсии для электронов.

Второе существенное различие связано с тем, что в случае электронов заселённость 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.

В основу настоящего обзора положены лекции Марка Лундстрема ‘Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications’ [2], Суприе Датты ‘Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts’ [1] и Тимоти Фишера ‘Thermal Energy at the Nanoscale’ [18], прочитанных в 2011–2013 годах в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u], а также наши статьи [32, 33].

Благодарю Н. Е. Кругляк за помощь в работе по подготовке рукописи к печати.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); www.nanohub.org/courses/FoN1.
2. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
3. Yu. Kruglyak, *J. Nanoscience*, **2014**, Article ID 725420, pp. 15; www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420.
4. Yu. A. Kruglyak, *Russian J. Phys. Chem.*, **88**, No. 11: 1826 (2014).
5. Дж. Займан, *Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых*

- телах* (Москва: ИИЛ: 1962).
6. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Москва: Высшая школа: 1974).
  7. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела* (Москва: Наука: 1978).
  8. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела* (Москва: Мир: 1979).
  9. М. Mohr, J. Maultzsch, E. Dobardžić, S. Reich, I. Milošević, M. Damnjanović, A. Bosak, and M. Krisch, C. Thomsen, *Phys. Rev. B*, **76**, No. 3: 035439 (2007).
  10. А. В. Елецкий, И. М. Искандарова, А. А. Книжник, Д. Н. Красиков, *УФН*, **181**: 227 (2011).
  11. М. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (New York: Cambridge University Press: 2012).
  12. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, № 3: 519 (2013); Erratum: *ibidem*, **12**, No. 2: 415 (2014).
  13. K. Schwab, E. A. Henriksen, J. M. Worlock, and M. L. Roukes, *Nature*, **404**: 974 (2000).
  14. C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **107**: 023707 (2010).
  15. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge, UK: Cambridge University Press: 2012).
  16. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **109**: 073718 (2011).
  17. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Физич. образов. в вузах*, **19**, № 3: 99 (2013).
  18. T. S. Fisher, *Thermal Energy at the Nanoscale* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/courses/2](http://www.nanohub.org/courses/2).
  19. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Физич. образов. в вузах*, **19**, № 2: 161 (2013).
  20. J. Callaway, *Phys. Rev.*, **113**, No. 4: 1046 (1959).
  21. M. G. Holland, *Phys. Rev.*, **132**, No. 6: 2461 (1963).
  22. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **111**: 093708 (2012).
  23. Gang Chen, *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (New York: Oxford University Press: 2005).
  24. C. J. Glassbrenner and G. A. Slack, *Phys. Rev.*, **134**, No. 4A: A1058 (1964).
  25. J. B. Pendry, *J. Phys. A*, **16**: 2161 (1983).
  26. D. E. Angelescu, M. C. Cross, and M. L. Roukes, *Superlatt. Microstruct.*, **23**: 673 (1998).
  27. L. G. C. Rego and G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 232 (1998).
  28. M. P. Blencowe, *Phys. Rev. B*, **59**: 4992 (1999).
  29. L. G. C. Rego and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B*, **59**: 13080 (1999).
  30. I. V. Krive and E. R. Mucciolo, *Phys. Rev. B*, **60**: 1429 (1999).
  31. C. M. Caves and P. D. Drummond, *Rev. Mod. Phys.*, **66**: 481 (1994).
  32. Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стриха, *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, **13**, No. 1: 6 (2013).
  33. Ю. А. Кругляк, *Физ. обр. в вузах*, **20**, No. 1: 39 (2014).

## REFERENCES

1. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*

- (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); [www.nanohub.org/courses/FoN1](http://www.nanohub.org/courses/FoN1).
2. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/resources/11763](http://www.nanohub.org/resources/11763).
  3. Yu. Kruglyak, *J. Nanoscience*, **2014**, Article ID 725420, pp. 15; [www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420](http://www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420).
  4. Yu. A. Kruglyak, *Russian J. Phys. Chem.*, **88**, No. 11: 1826 (2014).
  5. J. M. Ziman. *Electrons and Phonons. The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford: Clarendon Press: 1960).
  6. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge: Cambridge University Press: 1964).
  7. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (New York: John Wiley: 1971).
  8. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Philadelphia: Sanders College: 1979).
  9. M. Mohr, J. Maultzsch, E. Dobardžić, S. Reich, I. Milošević, M. Damnjanović, A. Bosak, M. Krisch, and C. Thomsen, *Phys. Rev. B*, **76**, No. 3: 035439 (2007).
  10. A. V. Eletskii, I. M. Iskandarova, A. A. Knizhnik, and D. N. Krasikov, *Sov. Physics Uspekhi*, **54**: 227 (2011); DOI: 10.3367/UFNe.0181.201103a.0233.
  11. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (New York: Cambridge University Press: 2012).
  12. Yu. A. Kruglyak, *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, **11**, No. 3: 519 (2013); Erratum: *ibidem*, **12**, No. 2: 415 (2014).
  13. K. Schwab, E. A. Henriksen, J. M. Worlock, M. L. Roukes, *Nature*, **404**, 974 (2000).
  14. C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **107**: 023707 (2010).
  15. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge: Cambridge University Press: 2012).
  16. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **109**: 073718 (2011).
  17. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Phys. High. Educ.*, **19**, No. 3: 99 (2013).
  18. T. S. Fisher, *Thermal Energy at the Nanoscale* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/courses/2](http://www.nanohub.org/courses/2).
  19. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Phys. High. Educ.*, **19**, No. 2: 161 (2013).
  20. J. Callaway, *Phys. Rev.*, **113**, No. 4: 1046 (1959).
  21. M. G. Holland, *Phys. Rev.*, **132**, No. 6: 2461 (1963).
  22. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **111**: 093708 (2012).
  23. Gang Chen, *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (New York: Oxford University Press: 2005).
  24. C. J. Glassbrenner and G. A. Slack, *Phys. Rev. A*, **134**, No. 4: 1058 (1964).
  25. J. B. Pendry, *J. Phys. A*, **16**: 2161 (1983).
  26. D. E. Angelescu, M. C. Cross, and M. L. Roukes, *Superlatt. Microstruct.*, **23**: 673 (1998).
  27. L. G. C. Rego and G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 232 (1998).

28. M. P. Blencowe, *Phys. Rev. B*, **59**: 4992 (1999).
29. L. G. C. Rego and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B*, **59**: 13080 (1999).
30. I. V. Krive and E. R. Mucciolo, *Phys. Rev. B*, **60**: 1429 (1999).
31. C. M. Caves and P. D. Drummond, *Rev. Mod. Phys.*, **66**: 481 (1994).
32. Yu. A. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, **13**, No. 1: 6 (2013).
33. Yu. A. Kruglyak, *Phys. High. Educ.*, **20**, No. 1: 39 (2014).

---

*Odessa State Environmental University,  
Lvivs'ka Str., 15,  
65016 Odessa, Ukraine*

- <sup>1</sup> Fig. 1. Simplified band structure. The width of the conduction band is marked as BW (Band Width). A dotted line shows frequently used parabolic dispersion.
- <sup>2</sup> Fig. 2. A simplified behaviour of dispersion for phonons. The dashed lines show the simplest (Einstein and Debye) models.
- <sup>3</sup> Fig. 3. Phonon dispersion curves.
- <sup>4</sup> Fig. 4. Phonon spectrum of graphene based on the cumulative experimental and calculated data.
- <sup>5</sup> Fig. 5. The conduction window for electrons (13) at two different temperatures. The energy  $E$  can be more or less than the Fermi energy.
- <sup>6</sup> Fig. 6. The conduction window for phonons (15) at two different temperatures. The energy of phonons can only be positive.
- <sup>7</sup> Fig. 7. To the derivation of connection between the transmission coefficient and the average length of free path by the example of a homogeneous 1D conductor.
- <sup>8</sup> Fig. 8. Temperature dependence of lattice thermal conductivity of silicon: experimental data [24], calculated curve [16].