



Анатичук Л.І.

**Анатичук Л.І. ак. НАН України,^{1,2}
Лусте О.Я. доктор фіз.-мат. наук^{1,2}**

¹Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна,
e-mail: anatysh@gmail.com;

²Чернівецький національний університет імені
Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58012, Україна
e-mail: anatysh@gmail.com



Лусте О.Я.

МОДЕЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ ДЕГРАДАЦІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ І ПРИКОНТАКТНИХ СТРУКТУР

Проведено аналіз сучасного стану і перспектив фізичних і комп'ютерних моделей деградації термоелектричних матеріалів і приконттактних структур. Розроблено класифікацію наявних комп'ютерних технологій, розглянуто актуальні напрямки їх використання для дослідження і розробки надійних термоелектричних модулів. Бібл. 102, Рис. 16.

Ключові слова: надійність, деградація, термоелектричні матеріали.

Вступ

Стрімке вдосконалення комп'ютерної техніки й програмного забезпечення відкриває нові можливості дослідження фізичних процесів у термоелектричних матеріалах, приладах і пристроях. Комп'ютерні технології усе ширше використовуються в термоелектриці [1]. Однак наявний їх арсенал набагато ширший за ті методи, які вже знайшли застосування в цій галузі, як, наприклад, методи скінчених елементів і програмні комплекси на їх основі [2, 3].

Чисельний експеримент став одним з основних інструментів дослідження [4]. Розробка й використання сучасних комп'ютерних технологій – одна з актуальних проблем моделювання в термоелектриці.

Одну з класифікацій методів комп'ютерного моделювання наведено у праці [5], де розглянуті:

- методи скінчених різниць [6, 7],
- методи скінчених елементів [8-11],
- методи скінчених об'ємів [12, 13],
- моделювання методом часток [5, 14, 15].

Під час розв'язання основних задач термоелектрики [16], а саме генерування електричної енергії, охолодження/нагрівання й створення сенсорів, доводиться досліджувати кілька полів різної природи на основі закону термоелектричної індукції [1], розглядати нелінійні моделі, оптимізувати моделі за багатьма параметрами, досліджувати надійність [17]. Для такого

комплексного аналізу можливе використання винятково чисельних методів і сучасних комп'ютерних технологій на їх основі.

Мета цієї роботи – провести аналіз сучасних чисельних методів і комп'ютерних технологій на їх основі, виявити перспективні методи моделювання й чисельного аналізу для розв'язку задач термоелектрики.

Загальна класифікація методів моделювання термоелектричних приладів і матеріалів

Основні методи моделювання фізичних полів – сіткові методи. Вони переважно використовуються для комп'ютерного моделювання макрооб'єктів. Для повного й всебічного аналізу термоелектричних матеріалів і приладів на їх основі необхідні універсальні й комплексні методи комп'ютерного моделювання.

На рис. 1 подано загальний підхід до комп'ютерного моделювання термоелектричних об'єктів будь-якої складності на різних стадіях дослідження, що наочно ілюструє взаємозв'язок характерних довжин і часів розглянутих у комп'ютерних моделях фізичних процесів.

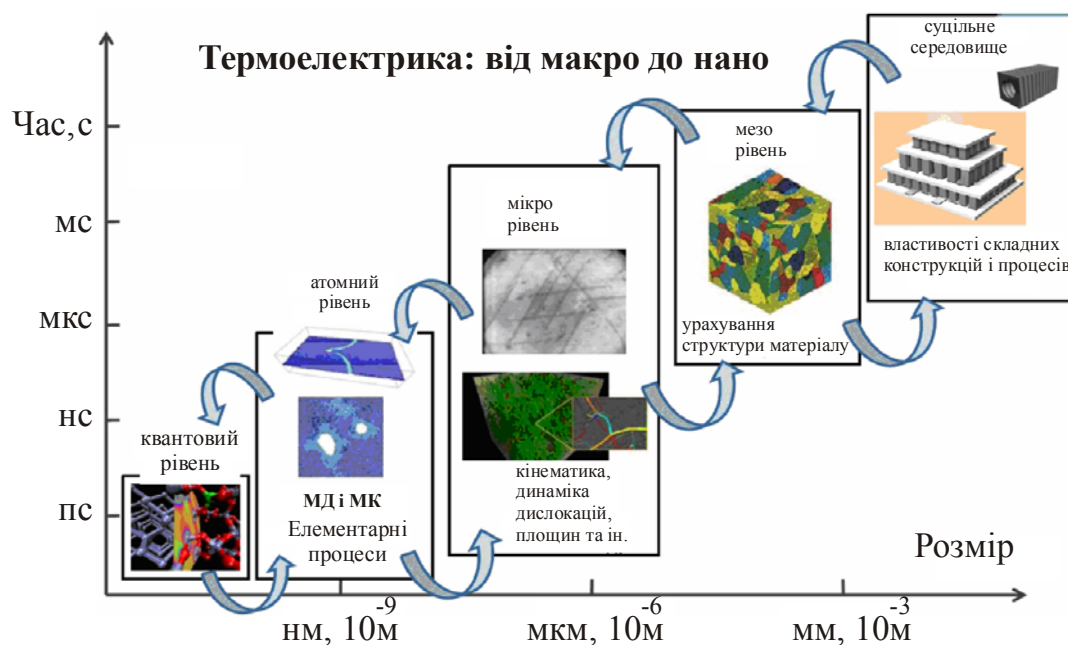


Рис. 1. Комп'ютерне моделювання в термоелектриці від макро до нано.

Загальні принципи побудови фізичних моделей на різних масштабах можна знайти в [18]. Ієрархія мультимасштабного моделювання, методи моделювання, які застосовуються в термоелектриці [19] на основі об'єктно-орієнтованого програмування [20], за різних характерних часів і довжин подано на рис. 2.

Моделювання системи часток з перших принципів (*ab initio*) на сьогодні можливе, коли кількість часток не перевищує 100. Застосуванню методу функцій Гріна, а також інших методів моделювання наноприладів присвячені праці [21 – 23]. Огляд квантових і класичних методів молекулярної динаміки можна знайти в [24 – 26]. Класичним методам Монте-Карло присвячено праці [27 – 28], огляд квантових методів Монте-Карло подано у праці [29].

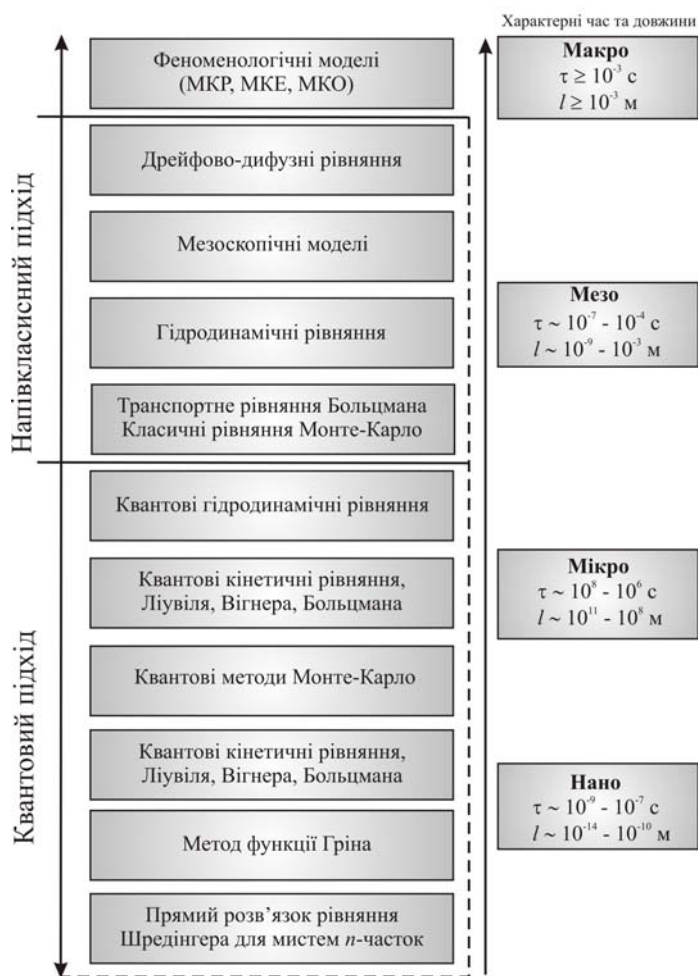


Рис. 2. Ієрархія методів моделювання.

Опису детерміністичного моделювання напівпровідників на основі рівняння Больцмана присвячено монографії [30 – 32]. Феноменологічним моделям термоелектричних приладів присвячено багато праць, зокрема [16, 33].

Структурно-функціональне моделювання

Традиційно методи комп'ютерного моделювання поділяють на дві великі групи, які подано на рис. 3.

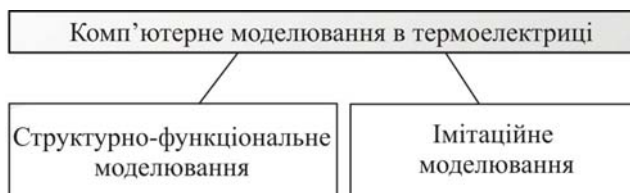


Рис. 3. Основні групи методів комп'ютерного моделювання в термоелектриці.

Перша група – структурно-функціональне моделювання об'єктів, які описуються за допомогою систем диференціальних або інтегро-диференціальних рівнянь.

Класифікацію методів структурно-функціонального моделювання подано на рис. 4.

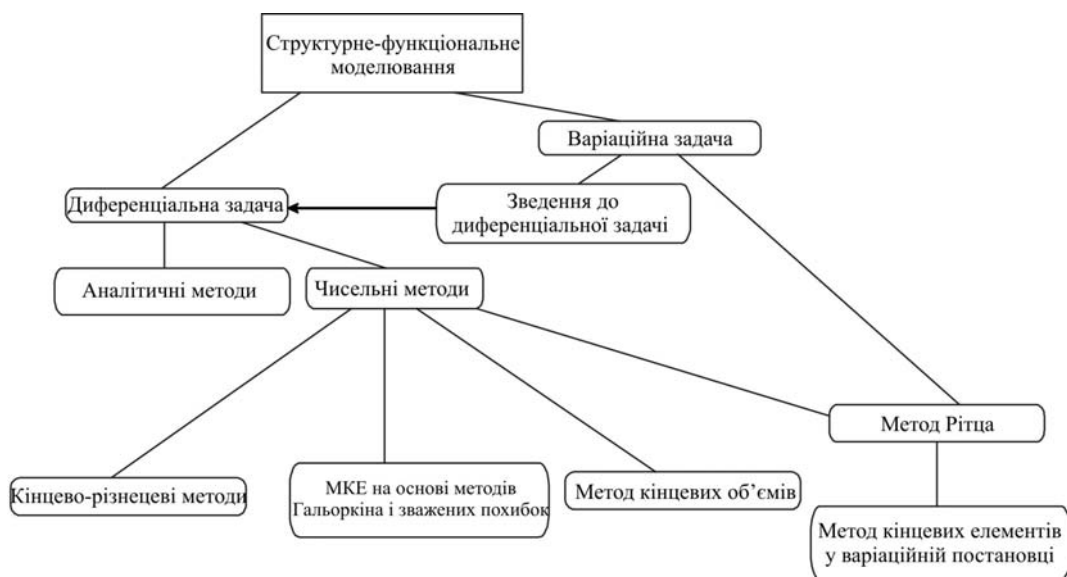


Рис. 4. Класифікація методів структурно-функціонального моделювання.

Другу групу – методи імітаційного моделювання для систем багатьох тіл буде розглянуто нижче.

У більшості випадків термоелектричні моделі зводяться до диференціальних (інтегро-диференціальних) рівнянь. Також задачу можна сформулювати у варіаційній постановці пошуку оптимуму функціонала, що у свою чергу зводиться до системи диференціальних рівнянь (якщо це можливо). За допомогою аналітичних методів можна розв'язати вузький клас задач, які переважно штучні й трудомісткі.

Чисельним методам властива універсальність, що дає можливість розв'язувати задачі, для яких аналітичний розв'язок знайти неможливо або занадто трудомістко. Кінцево-різницеві методи трапляються найчастіше, і до цієї групи методів можна віднести більшість відомих чисельних методів. Методи скінчених елементів – широко розповсюджені методи розв'язку задач моделювання фізичних полів у геометричних областях довільної форми. На рис. 4 подано тільки найвідоміші – метод Рітца й метод Гальоркіна. Метод скінчених об'ємів використовується рідко, найчастіше в гідродинаміці, іноді його не виділяють в окрему групу.

Скінчено-різницеві методи

Метод скінчених різниць (МСР) – найпростіший метод інтерполяції, найбільш вивчений і відомий. Його суть полягає в заміні нескінченно малих приростів у диференціальному рівнянні скінченими різницями шуканих функцій і змінних.

Основна ідея методу в тому, що шукана неперервна функція замінюється сукупністю наближених значень у деяких точках області – вузлах. Сукупність вузлів утворює сітку. Для урахування граничних умов утворюється система лінійних/нелінійних (у випадку коефіцієнтів, що залежать від незалежних змінних) алгебраїчних рівнянь щодо значень функції у вузлах сітки. Утворена система розв'язується одним із чисельних методів розв'язку систем рівнянь (Гауса, релаксації, простої ітерації, методами обертань, Якобі, Зейделя, прогону і т.д. [34]). Питання стійкості таких схем обговорюються в роботі [35].

У випадку розгляду моделей термоелектричних приладів, зокрема генераторів на основі термпарного термоелемента [36], використано кілька методів чисельного розв'язку: точні, ітеративні й методи усереднення. Розглянуто одновимірні стаціонарні рівняння для теплового

потоків й електричного струму. Як приклад термоелемента автори вибрали термопарний термоелемент у діапазоні температур $0 \div 900$ К. Результати моделювання узгоджуються із класичною аналітичною теорією термопарного елемента [37]. МКР також використовувалися для дослідження моделі термоелектричного охолоджувача [38], оптимізації концентрації носіїв заряду однодолинного напівпровідника [39]. На основі МКР досліджувалися термоелектричний генератор рулонного типу [40], моделі мікрозонда вимірювання потенціалу в неізотермічному напівпровіднику [41] і моделі термоелектричного холодильника [42, 43]. Розроблено програму розв'язку феноменологічних рівнянь, які описують ефекти Зеєбека, Холла, Нернста, Пельтьє, Еттінгсгаузена й Риги-Ледюка для об'єктів різної геометричної форми [44], МКР застосовувалися для дослідження сегментних термоелементів [45 – 46].

Методи скінчених різниць використовуються практично у всіх теоретичних дослідженнях і як допоміжний та основний інструмент.

Методи кінцевих елементів (МКЕ)

Суть методу

Скінчено-елементний аналіз став основним засобом дослідження в багатьох фізичних і інженерних задачах, у тому числі й у термоелектриці. Властивості термоелектричних приладів багато в чому залежать від геометричної форми компонентів приладу. Для моделювання фізичних полів різної складності МКЕ-аналіз дає універсальний і добре розроблений підхід для розв'язку прикладних задач термоелектричного приладобудування.



Рис. 5. Загальна схема розв'язку задачі методами скінчених елементів.

Загальна схема алгоритму розв'язку задачі моделювання фізичного поля методом скінчених елементів складається з таких етапів [11]:

- дискретизація області розв'язку;
- вибір інтерполяції розв'язку на скінченому елементі;
- формування базисних функцій;

- підрахунок похибки диференціальної задачі з використанням наближеного розв'язку у вигляді рядів;
- формування матриць жорсткості для елементів, ортогоналізація похибки;
- ансамблювання матриць жорсткості за елементами;
- урахування граничних умов;
- розв'язок системи алгебраїчних рівнянь [47, 48].

На рис. 4 подано загальну схему моделювання термоелектричних приладів за допомогою алгоритмів МСЕ.

Питання генерування сітки скінчених елементів обговорюються у праці [49]. Огляд методів триангуляції Делоне зроблено в [50]. Розгляду алгоритму Рапперта, розробленого спеціально для МСЕ, присвячено працю [51]. Можливості побудови сітки скінчених елементів для будь-якої геометричної області, якщо як елементи обрані 2D-трикутники/3D-тетраедри, обговорюються в роботі [52]. Технологічним аспектам застосування векторних скінчених елементів для розв'язання рівнянь Максвелла присвячено працю [53].

Методи кінцевих елементів зарекомендували себе як універсальний інструмент дослідження фізичних об'єктів і є найрозробленішими й найуніверсальнішими.

Використання МСЕ для дослідження термоелектричних моделей

Методи кінцевих елементів широко використовуються для дослідження термоелектричних моделей. Якщо у праці [54] МСЕ розглядається з одномірними елементами без урахування контактного опору з невеликою кількістю ітерацій через невелику потужність комп'ютерної техніки того часу, то в [55] розглядається тривимірне стаціонарне й нестационарне моделювання однокаскадного й багатокаскадного холодильника Пельтьє за допомогою програмного комплексу ANSYS 9.0. Навіть за таких умов у [54] проводиться порівняльний аналіз МСЕ з методами усереднення. Автори праці роблять висновок, що МСЕ точніший і дає кращу оптимізацію. Можна стверджувати, що МСЕ – найбільш універсальний, точний і перспективний метод моделювання для термоелектрики. В 2009 році з'явилася нова 12 версія ANSYS, яка містить окремий термоелектричний модуль, до складу пакета ввійшли також нові модулі, створення геометрії моделі стало значно легшим, а також з'явилася низка нових удосконалень. Зокрема, у праці [56] для моделювання термоелектричних льодогенераторів побутових холодильників застосовувався модуль ANSYS FLUENT, призначений для розв'язку задач обчислювальної гідро-газодинаміки. Висока продуктивність і точність цього модуля дали можливість враховувати ефекти, які до цього не бралися до уваги, і здійснювати моделювання приладу в цілому. Експериментальні дані добре узгоджуються з моделлю. Приклади використання нової версії пакета ANSYS, у тому числі й термоелектричного модуля, можна знайти на сайті [57].

МСЕ знайшов своє застосування в багатьох областях, таких як механіка деформованого твердого тіла, теплообмін, гідродинаміка й електромагнітні поля, а в останні роки й термоелектрика. На прикладі охолоджувача Пельтьє й на основі класичних рівнянь термоелектрики побудована кінцево-елементна схема для знаходження температурного розподілу й профілю розподілу електричного потенціалу [55]. Автори підкреслюють, що

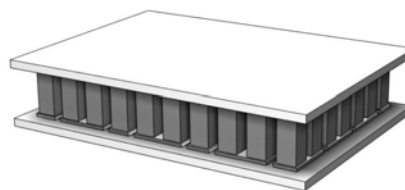


Рис. 6. Модель охолоджувача.

ANSYS дає можливість моделювати спряжені поля і що ANSYS уже заповнив прогалину, якою було термоелектричне моделювання. На рис. 5 подано модель охолоджувача. Моделювання термоелектричних пристроїв потребує урахування не тільки електромагнітних і температурних полів, а й викликаних ними ефектів термопружності й п'єзоефекту. Робота [58]

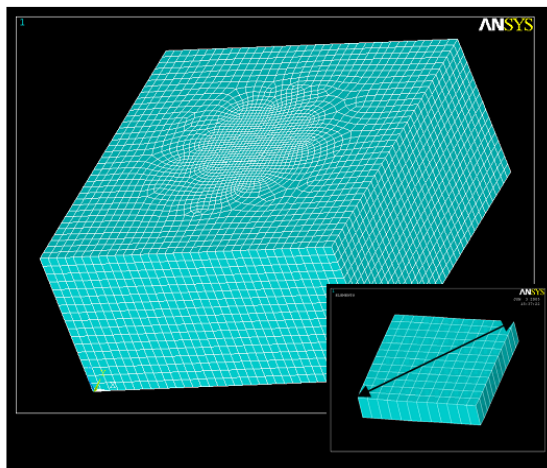


Рис. 7. Сітка скінчених елементів для контакту.

присвячена моделюванню термоелектричного поля в пристрої SP-100 і мінімізації всіх видів деформації за допомогою МСЕ й програмного комплексу ANSYS.

У праці [59] подається огляд функціонально-градієнтних матеріалів (ФГМ) – ще одного перспективного напрямку підвищення термоелектричної ефективності. Автор наголошує на необхідності чисельного моделювання властивостей ФГМ і їх оптимізації. Експериментальні дані дуже добре узгоджуються з моделлю, описаною феноменологічними рівняннями теплового

балансу. Вказується на необхідність урахування об'ємних ефектів Пельтьє, Томсона й на можливість апроксимації коефіцієнтів термоЕРС сплайнами. Сплайни використовувалися також для обчислення методом колокації (один з видів МСЕ) термоЕРС різних термоелектричних приладів [60]. Автор указує на високу точність МСЕ й узгодженість теоретичних розрахунків з експериментом. Таким чином, для розв'язання задач термоелектрики у випадку феноменологічної постановки задачі необхідно використовувати методи скінчених різниць та методи скінчених елементів.

У праці [61] розглядається мікроматричний термоелемент, змодельований із застосуванням 3D МСЕ. На основі законів збереження енергії і заряду будується алгоритм розв'язку для знаходження профілю температури. За допомогою МСЕ досліджується матричного виду термоелемент, кожна з віток якого відділена від інших склом, і зрештою робиться незрозумілий висновок, що коефіцієнт теплопровідності такої конструкції менший, але вихідна потужність не збільшується.

Про ще одне застосування тривимірного МСЕ й ANSYS йдеться в роботі [62], у якій об'єкт дослідження – одновитковий термоелемент Пельтьє на основі Bi_2Te_3 . Досліджується контактний ефект. Автори роблять порівняльний аналіз 3D-моделі й одновимірної моделі. Площа контакту охолоджувальної поверхні в першому випадку менша, і результати моделювання збігаються з одновимірним моделюванням. Таким чином, зменшення площі контакту навіть за рівномірного розподілу напруги не дає виграшу в температурі охолодження. Лише рівномірний розподіл струму по площі контакту дає збільшення температури охолодження на 21 %. Автори відзначають, що технічна реалізація такої умови потребує використання матричної структури точкових контактів і цим можна досягти довільного розподілу потенціалу в кожній комірці й забезпечити максимальне охолодження деяких ділянок.

На рис. 7 подано сітку скінчених елементів для моделі контакту. Ця робота ще раз підтверджує необхідність використання саме тривимірного моделювання для адекватного, найбільш повного опису й урахування термоелектричних ефектів.

Широке використання ANSYS затінило інше програмне забезпечення на основі скінчених елементів. Пакет Comsol Multiphysics на відміну від ANSYS дає можливість моделювати й досліджувати без детального знання особливостей МСЕ. Інтуїтивно-зрозумілий інтерфейс дає можливість дослідникові зосередити увагу саме на фізичній задачі, не замислюючись над алгоритмічно-програмістськими проблемами. Відносно мала поширеність Comsol Multiphysics призвела до відсутності статей, посібників і описів цього програмного пакету за винятком Інституту термоелектрики, у якому вже кілька років ведеться систематичне дослідження термоелементів за допомогою МСЕ й програмного пакета Comsol Multiphysics: дослідження прямокутного спірального анізотропного термоелемента [62], короткозамкнених термоелементів [63]. На основі результатів моделювання розроблено теорію зонально-неоднорідного термоелемента [3].

Можливості Comsol Multiphysics для термоелектрики описуються у праці [64], у якій подаються 4 приклади використання МСЕ для різних термоелектричних приладів – охолоджувача й генератора. Для моделювання температурного й електричного полів використовується PDE-форма (partial differential equation) рівнянь термоелектрики. У статті описано різні можливості МСЕ для моделювання термоелектричних об'єктів, а також можливість створення моделей як стаціонарних, так і нестаціонарних з різними геометріями й полями різної природи. Прикладами використання об'єктно-орієнтованого програмування і МСЕ для створення моделей термоелектричних генераторів і теплообмінників є праці [65, 66].

Застосуванню МСЕ в мікроелектроніці, дослідженню термоелектричних ефектів у MEMS присвячені роботи [67-70], розроблений спеціалізований модуль more4ANSYS на основі алгоритмів [71]. МСЕ також застосовувався для моделювання технологічних процесів, зокрема технології спікання порошку [72].

Хоча моделювання й використання комп'ютерних технологій на основі МСЕ у термоелектриці широко використовується, воно несистематичне або допоміжне, а не є основним методом дослідження. Окрім того, на сьогодні немає спеціалізованого програмного забезпечення для моделювання термоелектричних явищ і приладів.

Таким чином, застосування методів скінчених елементів і комп'ютерних технологій на їх основі відкриває широкі можливості для дослідження нових властивостей термоелектричних матеріалів, моделей, технологій. МСЕ – один з основних методів моделювання, який добре себе зарекомендував, і є одним із найперспективніших методів комп'ютерного моделювання для термоелектричного приладобудування.

Скінчено-об'ємні методи

Метод скінчених об'ємів широко використовується в гідродинаміці. У термоелектриці для комірок з довільною кількістю граней (ребер) формулюються алгебраїчні співвідношення, іноді суттєво нелінійні й більш схожі на гідравлічні формули. На відміну від МСЕ й методу скінчених різниць у них немає вузлових визначальних параметрів середовища, надано перевагу параметрам на ребрах і гранях.

Наявність тривимірних ефектів призводить до необхідності використовувати метод скінчених об'ємів, алгоритм якого можна розділити на такі етапи [36].

1. Визначення керуючих рівнянь:

$$\nabla(\chi * \nabla T) = p\vec{J}^2 - T\vec{J} \left[\frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T + (\nabla \alpha)_T \right] = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \vec{J} = 0, \quad (2)$$

$$\vec{J} = -\delta \left[\nabla \left(\frac{M}{e} + V \right) + \alpha \nabla T \right], \quad (3)$$

$$\vec{q} = \alpha T \vec{J} - \alpha \nabla T, \quad (4)$$

$$\alpha = \alpha(T), \chi = \chi(T), \delta = \delta(T), p = p(T), \quad (5)$$

з граничними умовами

$$\begin{aligned} T &= T_0, \vec{q} = \vec{q}_0, \\ V &= V_0, \vec{J} = \vec{J}_0. \end{aligned} \quad (6)$$

Для знаходження стаціонарного розв'язку пропонується розглядати нестационарну систему диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma_T} \frac{\partial T}{\partial t} &= \nabla (\chi \nabla T) + f(T, U), \\ f(T, U) &= p \vec{J}^2 - T \vec{J} \left[\frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T + (\nabla \alpha)_T \right], \\ \frac{1}{\gamma_U} \frac{\partial U}{\partial t} &= -\nabla \vec{J}, \end{aligned} \quad (7)$$

де γ_T й γ_U – параметри.

2. Дискретизація області. Область паралелепіпеда розбивається на кубики.
3. Заміна диференціальних рівнянь у частинних похідних алгебраїчними рівняннями.
4. Алгоритм розв'язку системи алгебраїчних рівнянь.

Похідні замінюють кінцевими різницями, ураховуються також граничні умови. Окремо будується різницєва схема на границі області, що призводить до системи нелінійних алгебраїчних рівнянь тридіагонального виду. При цьому бажано використовувати неявні методи розв'язку системи диференціальних рівнянь, які в цьому випадку дають абсолютну збіжність, на відміну від явних методів Адамса або Рунге-Кутта [7]. Робиться висновок, що тривимірне моделювання методом скінчених об'ємів дає можливість установити нові ефекти й відтворювати справжню картину процесу на відміну від класичних методів чисельного розв'язку диференціальних рівнянь.

Можна зробити висновок, що методи скінчених об'ємів – перспективні, але ще не адаптовані до термоелектрики засобами моделювання. Необхідні розробки спеціалізованих алгоритмів і програмного забезпечення для розв'язку задач термоелектрики.

Імітаційне моделювання

Імітаційне моделювання – це дослідження математичної моделі у вигляді алгоритмів, що відтворюють функціонування системи шляхом послідовного виконання великої кількості елементарних операцій. Класифікацію методів імітаційного моделювання для систем багатьох тіл подано на рис. 8. Інший шлях покращення властивостей термоелектричних приладів – це покращення параметрів матеріалів і винайдення нових. Для моделювання властивостей матеріалів використовуються методи Монте-Карло й молекулярної динаміки [73, 74].

Етапи багаторівневого проектування нових матеріалів на основі комп'ютерного моделювання подано на рис. 8. Такий інтегральний підхід дає можливість проектувати нові матеріали із заданими властивостями.



Рис. 8. Класифікація методів імітаційного моделювання.

Традиційно методи моделювання поділяють на основні групи залежно від розміру модельованої системи. Методи молекулярної динаміки, Броунівської молекулярної динаміки, гібридні методи й гідродинамічне моделювання можна позначити одним терміном – моделювання методом часток.

Методи Монте-Карло. Загальні властивості й класифікація

Однозначного визначення методів Монте-Карло немає, але можна стверджувати, що методи Монте-Карло – це чисельні методи розв’язку математичних задач (систем алгебраїчних, диференціальних, інтегральних рівнянь) і пряме статистичне моделювання (фізичних, хімічних, біологічних, економічних, соціальних процесів) за допомогою одержання й перетворення випадкових чисел.

Перша праця, у якій систематично викладався метод Монте-Карло, опублікована 1949 року Метрополісом і Уламом [75], де метод Монте-Карло застосовувався для розв’язку лінійних інтегральних рівнянь. Праці з методів Монте-Карло стали активно публікуватися після Міжнародної Женевської конференції із застосування атомної енергії в мирних цілях. Однією з перших була стаття Владимірова й Соболя [76]. Монографія [77] – перша систематична робота, присвячена розгляду статистичної теорії неідеальних систем, заснованій на вивченні систем багатьох часток.

Методи Монте-Карло поділяють на класичні й квантові. Виділяють також дифузійний метод Монте-Карло [78].

Класичні методи Монте-Карло для системи часток засновані на стохастичному переборі точок фазового простору із переважною вибіркою тих областей, які дають істотний внесок в інтеграл вигляду

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\Omega} A(\mathbf{R}) p(H(\mathbf{R})), \quad (8)$$

де A – функція стану системи, $H(\mathbf{R})$ – гамільтоніан системи, $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ – задає один стан системи, $\mathbf{r}_i, i = \overline{1, N}$ – задає всі ступені свободи однієї частки, p – функція розподілу, $Z = \int_{\Omega} p(H(\mathbf{R})) d\mathbf{R}$ – статистична сума. Відповідно до функції розподілу генерується ланцюг станів у фазовому просторі, уздовж якого обчислюється інтеграл (8). За прямування кількості

елементів у ланцюзі до нескінченності можна одержати точне значення середнього. У випадку кінцевого числа елементів ланцюга можна одержати значення інтеграла (8) точніше, ніж звичайними методами інтегрування.

Квантові методи Монте-Карло застосовуються для моделювання квантової системи багатьох тіл, наприклад, для розв'язку рівняння Больцмана для системи фононів [79]. В основному група цих методів застосовується для обчислення багатовимірних інтегралів, що виникають під час розв'язання рівняння Шредінгера –

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi(\mathbf{R}, \tau) = \hat{H} \varphi(\mathbf{R}, \tau). \quad (9)$$

Різні аспекти застосування квантових методів Монте-Карло розглянуті у працях [31, 80].

Моделювання термоелектричних наноприладів і матеріалів

Останнім часом тема нанотехнологій стала дуже популярною, у тому числі й у термоелектриці [81 – 83], і методи Монте-Карло є одним із інструментів моделювання й дослідження властивостей таких пристроїв і матеріалів.

Як відзначалося вище, ще одним підходом до моделювання термоелектричних об'єктів є статистичні методи або методи Монте-Карло. У роботі [84] подано алгоритм Монте-Карло для моделювання термоелектричних властивостей нанокompatитів. Розглянуто як двовимірні, так і тривимірні моделі для вивчення переносу фононів. Тривимірне моделювання дало високі показники ефективної теплопровідності. Автори відзначають, що розміщені випадковим чином наночастки дають теплопровідність дуже близьку до того випадку, коли частки розміщені періодично. Тривимірне моделювання виявляє нові ефекти й визначає інші термоелектричні властивості. Метод Монте-Карло застосовувався також для обчислення нелінійного коефіцієнта Пельтьє [85] для *InGaAs*. Чисельні значення добре узгоджуються з аналітичними виразами. Метод Монте-Карло є також одним з потужних засобів розв'язку рівняння Больцмана.

У праці [86] дається порівняльний аналіз для двох моделей: апроксимація часу релаксації для кінетичного рівняння Больцмана й розв'язок цього рівняння за допомогою сферичних гармонік. У результаті дослідження з урахуванням анізотропії ефективної маси зроблено висновок, що в моделі розсіювання електронного газу на іонізованих домішках вплив анізотропії ефективної маси на величину коефіцієнта Зеєбека невеликий. Навіть зі збільшенням часу релаксації добротність матеріалу також не збільшується.

Ряд праць присвячено теоретичному дослідженню термоелектричних ефектів молекулярної електроніки [87 – 90]; досліджено можливість створення наноструктурних термоелектричних приладів [91] і нових матеріалів [92]; нові термоелектричні ефекти [93, 94]; розглянуто перспективи розвитку нанотехнологій у термоелектриці, зокрема проведено дослідження термоелектричних властивостей наноконтакту двох нанотрубок з *Bi₂Te₃* і *Sb₂Te₃* [95]. У праці [96] змодельовано незворотні ефекти в термоелектричних наноматеріалах на прикладі ґратки із квантових точок.

У роботі [90] розглядається термоелектричний ефект у молекулярних сполуках. Досліджується модель металевий контакт-молекула-металевий контакт. На основі аналітичного опису і чисельного моделювання показано, що термоелектричний потенціал дає важливу інформацію про механізми контролю руху електронів, включаючи слабку електрон-електронну взаємодію й теплове розсіювання. Показано, що за високих температур положення енергії Фермі відносно молекулярних станів можна вивести з термоелектричного потенціалу. Термоелектрична потужність не залежить від матеріалу, з якого зроблені контакти.

Методи Монте-Карло привабливі для комп'ютерного моделювання в термоелектриці. Їх використання веде до кращого розуміння походження термоелектричних явищ, що відкриває можливості для створення й прогнозування властивостей нових термоелектричних матеріалів.

Моделювання методом часток

Моделювання методом часток – відносно новий і мало розроблений порівняно із МСЕ метод – у термоелектриці практично не використовувалось. Метод часток моделює саме імітуванням складових фізичного об'єкта. Опис моделей часток в комірі для термоелектричних ефектів подано в роботі [97] для найпростіших геометрій (два дроти). Як термоелектричні матеріали обрані метали. Термоелектричні явища розглядаються для ансамблю часток, а саме електронного газу. За стану рівноваги розподіл задовольняє закон Фермі-Дірака. Розглядаються ефекти Зеебека, Пельтьє й Томсона. Обчислювальна модель, а також розроблена програма відсутні. У кількох працях на основі формалізму Кубо досліджено одновимірну модель Хаббарда [98, 99]. Обчислено основні кінетичні коефіцієнти – електропровідність, теплопровідність і коефіцієнт термоЕРС.

Хоча моделювання методом часток використовується в основному для дослідження фізико-хімічних властивостей суцільних середовищ, воно знаходить своє застосування й для розв'язку механічних задач сильного непружного деформування й руйнування [100]. У праці зроблено огляд з моделювання методом часток швидкісного руйнування твердих тіл. Розглянуто конкретні задачі: пробиття перешкод ударником, який деформується, руйнування шару під дією сферичної хвилі розтягу, відкольне руйнування у випадку плоскої ударної взаємодії пластин (рис. 9). Даються основні положення цього методу. У разі моделювання методом часток не обов'язково розглядати фізичні частки (електрони, іони, молекули), а можна розглядати віртуальні макрочастки, взаємодія яких описується деякими потенціалами [101]. Кожна частка має свої специфічні властивості. Використання методу часток не вимагає опису складної теорії, багато ефектів з'являється автоматично. У цьому значна перевага саме імітаційного моделювання. Але метод часток вимагає великої потужності комп'ютерів, оскільки для адекватного моделювання необхідна велика кількість часток ($\sim 10^8$). Для реалізації такої імітаційної програми необхідні вже багатопроцесорні мейнфрейми. Дослідження деформацій – перспективний напрямок для дослідження надійності термоелектричних приладів.

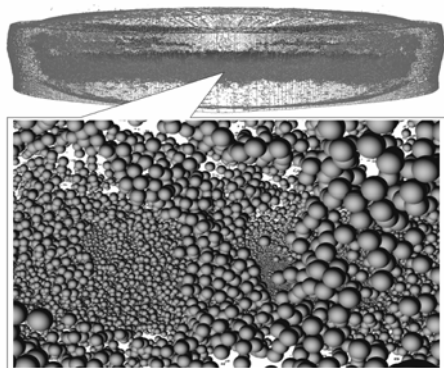


Рис. 9. Тривимірна модель відкольного руйнування тіла. Містить 100 мільйонів частинок.

Предметом огляду [102] є наномасштабне теплоперенесення. Експериментально вивчено теплопровідність багатьох поверхонь розділу твердих тіл, але діапазон спостережуваних властивостей набагато менший за передбачений теорією. Стрімкий розвиток мікроелектроніки відповідно до закону Мура зумовив до необхідності дослідження властивостей наноматеріалів. Мікроелектронні пристрої занадто великі для прямого моделювання на атомному рівні, тому основним методом моделювання є кінетичне рівняння Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}, \quad (10)$$

де $F(\mathbf{x}, t)$ – поле зовнішніх сил, $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ – функція розподілу густини в одночастковому фазовому просторі, \mathbf{p} – імпульс, \mathbf{x} – координата, m – маса, $\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$ – член зіткнень.

Моделювання методом часток – ще один перспективний метод комп'ютерного моделювання, що відкриває можливості для виявлення нових термоелектричних ефектів і створення матеріалів із заданими властивостями.

Моделювання інтенсивності відмов термоелектричних модулів в режимі генерації

Як ефективний приклад використання МСЕ й програмного пакета Comsol Multiphysics наведемо результати дослідження інтенсивності відмов термоелектричних модулів 3 типів TEC1 7107, TEC1 12715 та TEC1 12704 в інтервалі температур 80 – 280 °С.

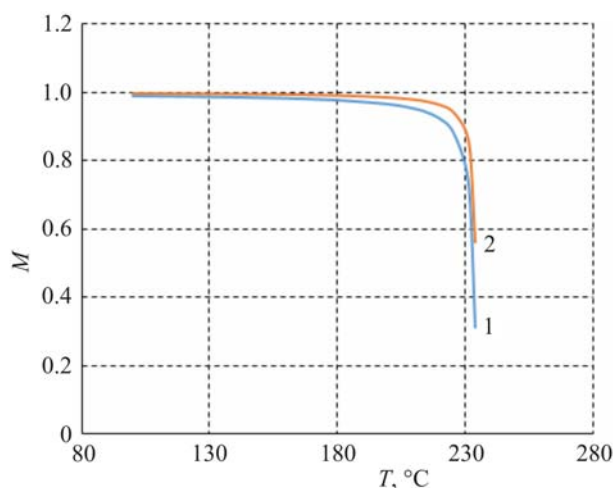


Рис. 10. Температурна залежність інтенсивності відмов, згідно з теорією надійності.

1 – тип TEC1 7107 та TEC1 12715; 2 – тип TEC1 12704

Температурна залежність інтенсивності відмов M , згідно з теорією надійності, задовольняє з довірчою ймовірністю $P = 0.9$ закону Ареніуса з точками Кюрі для температури плавлення припою. Для трьох типів модулів ці залежності наведено на рис. 9.

Враховуючи наведену температурну залежність інтенсивності відмов з експериментальних даних було отримано залежності спадання електричної потужності та ККД модулів від кількості напрацьованих годин (рис. 10 – 15).

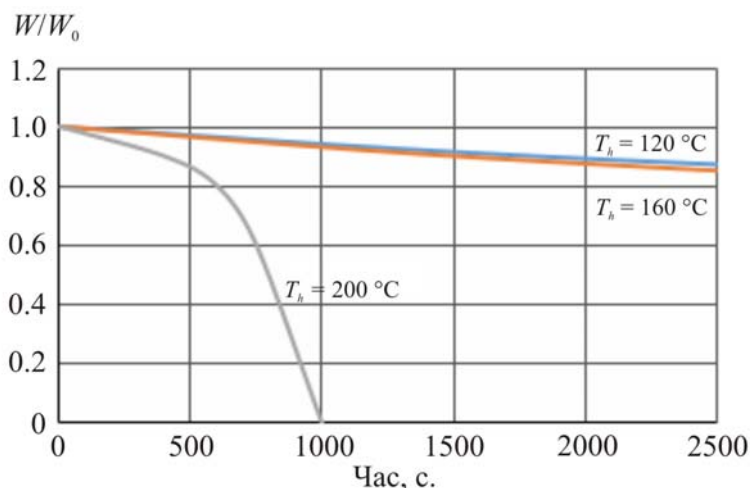


Рис. 11. Залежність електричної потужності модулів типу TEC1 7107 від кількості напрацьованих годин.

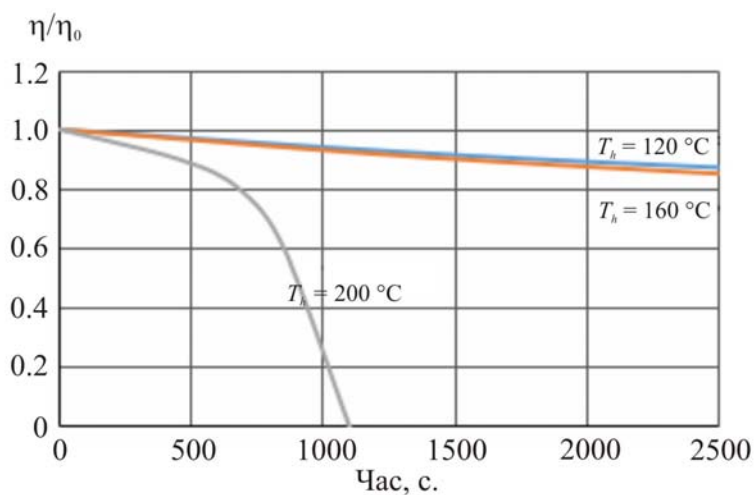


Рис. 12. Залежність ККД модулів типу TEC1 7107 від кількості напрацьованих годин.

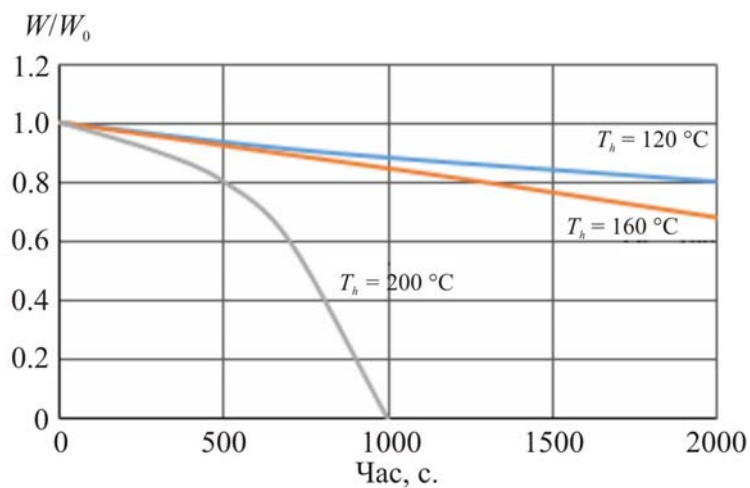


Рис. 13. Залежність електричної потужності модулів типу TEC1 12704 від кількості напрацьованих годин.

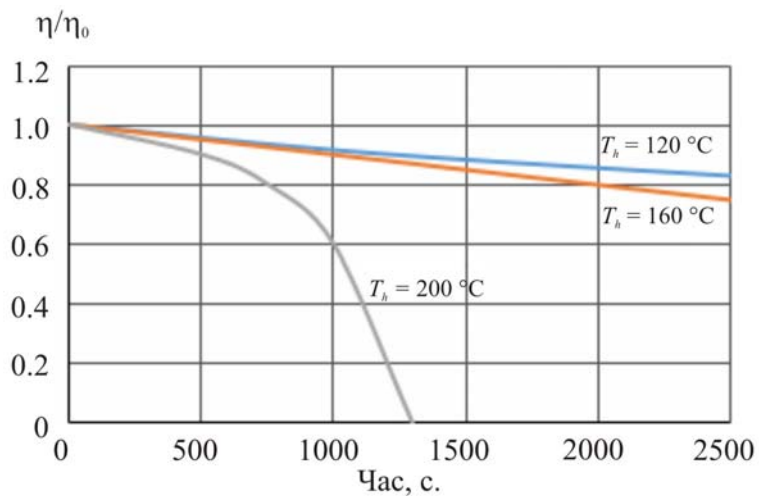


Рис. 14. Залежність ККД модулів типу TEC1 12704 від кількості напрацьованих годин.

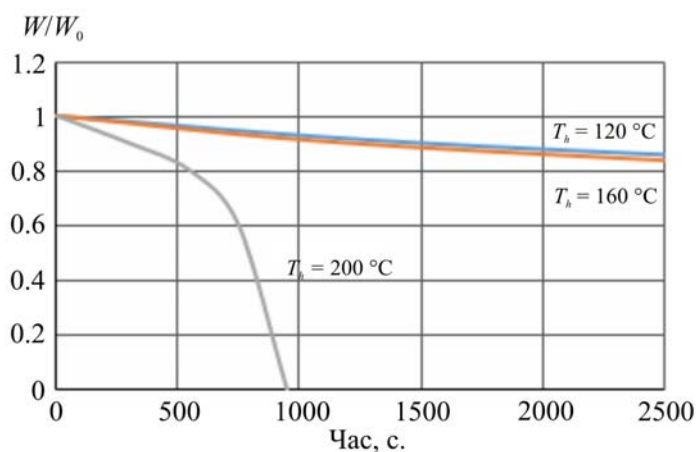


Рис. 15. Залежність електричної потужності модулів типу TEC1 12715 від кількості напрацьованих годин.

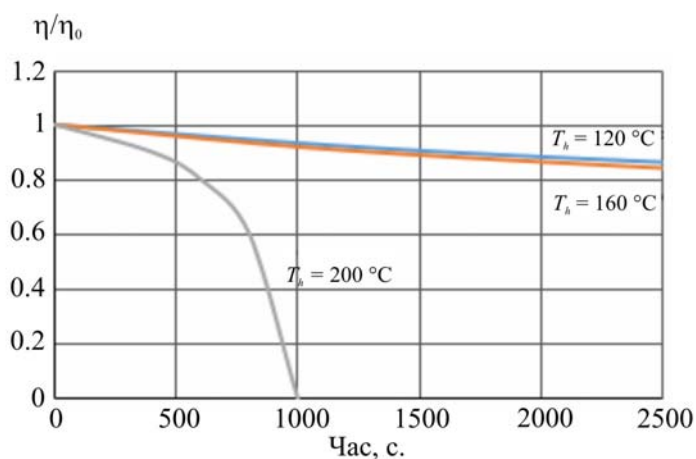


Рис. 16. Залежність ККД модулів типу TEC1 12715 від кількості напрацьованих годин.

Висновки

1. Комп'ютерні технології і здійснення обчислювальних експериментів – основний інструмент теоретичного дослідження термоелектричних моделей.
2. Показано, що методи скінчених елементів – найбільш розроблені й універсальні методи створення і дослідження феноменологічних моделей термоелементів і термоелектричних приладів.
3. Необхідна розробка алгоритмів методу скінчених елементів для термоелектричних явищ, зокрема векторного МСЕ й спеціалізованого програмного комплексу для моделювання термоелектричних приладів.
4. Метод скінчених об'ємів – перспективний метод моделювання фізичних полів, але на сьогодні не застосовується в термоелектриці. Необхідна розробка алгоритмів МСО й програмного забезпечення, що реалізують цей метод.
5. Моделювання методом часток та інші статистичні методи моделювання перспективні для вивчення, моделювання і виявлення нових термоелектричних ефектів і дослідження вже відомих.

6. Методи часток, Монте-Карло й молекулярної динаміки відкривають можливості для проектування нових термоелектричних матеріалів із заданими властивостями. Необхідна розробка алгоритмів, відповідного програмного забезпечення й моделей, що реалізують метод часток. Великі обчислювальні труднощі у випадку використання методу часток призводять до необхідності використання алгоритмів паралельних обчислень.
7. Основний висновок полягає в тому, що всі описані моделі термоелектричних модулів є детермінованими, і що досі не розглянуто можливості комп'ютерного моделювання випадкових відмов термоелектричних модулів. Усі комп'ютери обладнані генераторами псевдовипадкових чисел, що є могутнім засобом вивчення випадкових процесів детермінованими не випадковими комп'ютерами. Алгоритми роботи генераторів псевдовипадкових чисел є секретом фірм, який відомий хіба що компіляторам програм, написаних на мовах високого рівня. Вже доведено високу ефективність дослідження випадкових процесів за допомогою генераторів псевдовипадкових чисел. Настає час використання таких компютерних програм для потреб термоелектрики.

Література

1. Anatyshuk L.I. The law of thermoelectric induction and its application for extending the capabilities of thermoelectricity // Proceedings ICT'03. 22nd International Conference on Thermo-electrics. La Grande Motte, France. – 2003. – P. 472-475.
2. Jaegle M. Simulating Thermoelectric Effects with Finite Element Analysis using Comsol // European COMSOL Conference - Oral Presentations November 04 - 06, Hannover. – 2008.
3. Кузь Р. В. Вихровий зонально-неоднорідний термоелемент / Р. В. Кузь. – Чернівці, 2007. – 122 с. – (Дис... канд. фіз.-мат. наук: 01.04.01).
4. Самарский А. А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. – М.: Физматлит, 2001. – 320 с.
5. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц Пер. с англ. / Р. Хокни, Дж. Иствуд – М.: Мир, 1987. – 640 с.
6. Ортега Дж. Введение в численные методы дифференциальных уравнений Пер. с англ.: Под ред. А.А. Абрамова. / Дж. Ортега, У. Пул – М.: Наука, 1986. – 288 с.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем. – / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
8. Сабоннадьер Ж.К. Метод конечных элементов и САПР Пер. с франц. / Ж.К. Сабоннадьер, Ж.-Л. Кулон – М.: Мир, 1989. – 190 с.
9. Шайдуров В.В. Многосеточные методы конечных элементов. – / В.В. Шайдуров М.: Наука. – 1989. – 288 с.
10. Митчелл П. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными Пер. с англ. – / П. Митчелл, Р. Уэйт. – М.: Мир, 1977. – 216 с.
11. Зенкевич О. Конечные элементы и аппроксимация Пер. с англ. – / О. Зенкевич, К. Морган. – М.: Мир, 1986. – 318 с.
12. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для решения эллиптических уравнений. – / В.П. Ильин. – Новосибирск: ИМ СОРАН, 2000. – 345 с.
13. Щерба А.А. Моделирование и анализ электрических полей энергетических объектов. – / А.А. Щерба, М.М. Резинкина. – К.: Наук. книга, 2008. – 248 с.
14. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – / Д. Поттер. – М.: Мир, 1975. – 392 с.

15. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From algorithms to Applications. – Academic Press. – 2002. – 638 p.
16. Анатичук Л. И. Термоэлектричество. Термоэлектрические преобразователи энергии. – / Л.И. Анатичук. – Киев, Черновцы: Институт термоэлектричества, 2003. – 376 с.
17. <http://www.ferrotec.com/technology/thermoelectric/thermalRef10.php>
18. Hangos K., Cameron I. Process Modelling and Model Analysis. – London: Academic Press, 2001. – 544 p.
19. Luste O.J. Computer Technologies in thermoelectricity // XIII Международный форум по термоэлектричеству. – 2009.
20. Буч Г. Объектно-ориентированный анализ и проектирование с примерами приложений на C++. 2 изд. Пер. с англ. – / Г. Буч. – М.: Издательство Бином, СПб.: Невский диалект, 1999 г. – 560 с.
21. Anantram M.P., Lundstrom M.S., Nikonov D.E. Modeling of nanoscale devices // Proceedings of the IEEE. – 2008. – Vol. 96, № 9. – P. 1511 - 1550.
22. Paulsson M. Non Equilibrium Green's Functions for Dummies: Introduction to the One Particle NEGF equations // School of Electrical & Computer Eng, Purdue Univ, W. Lafayette IN, – 2004. – P. 1-9.
23. Datta S. Nanoscale Device Modeling: The Green's Function Method // Superlattices & Microstructures. – 2000. – Vol. 28, № 4. – P. 253-278.
24. Sutmann G. Classical Molecular Dynamics // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. — P. 211-254.
25. Lubich Ch. Integrators for Quantum Dynamics: A numerical Analyst's Brief Review // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. — P. 459-466.
26. Manthe U. Quantum Molecular Dynamics with Wave Packets // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. – P. 361-375.
27. Kratzer P. Monte Carlo and kinetic Monte Carlo methods – a tutorial // Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences - Lecture Notes, NIC Series, Jülich, Forschungszentrum Jülich – 2009. – P. 51 – 76.
28. Lewerenz M. Monte Carlo Methods: Overview and Basics // <http://www.fz-juelich.de/nic-series/> Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. – P. 1-24.
29. Foulkes W.M.C. Quantum Monte Carlo simulations of solids // Rev. Mod. Phys. – 2001. – Vol. 73, № 1. – P. 33-83.
30. Galler M. Multigroup equations for the description of the particle transport in semiconductors. – Singapore: World Scientific Publishing, 2005. – 234 p.
31. Weib J.-P. Numerical analysis of Lattice Boltzmann methods for the heat equation on bounded interval. – Universitat Karlsruhe (TH), 2006. – 190 p.
32. Jünger A. Transport Equations for Semiconductors. – Heidelberg, Springer, 2009. – 315 p.
33. Лусте О.Я. Фізика вихрових термоелементів і вимірювальних приладів на їх основі: – / О.Я. Лусте. – Чернівці, 2003. – (Дис. доктора фіз.-мат. наук)

34. Вержбицкий В.М. Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения): Учеб. пособие для вузов – / В.М. Вержбицкий. – М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век», 2005. – 432 с.
35. Голуб Дж. Матричные вычисления. – / Дж. Голуб, Ван Лоу Ч. – М.: Мир, 1999. – 548 с.
36. Rowe D.M. Thermoelectric Handbook // Hogan T., Shih T. Modeling and Characterization of Power Generation Modules Based on Bulk Materials. – Taylor & Francis Group. – 2006.
37. Бурштейн А.И. Физические основы расчёта полупроводниковых термоэлектрических устройств. – / А.И. Бурштейн. – М.: Физматлит, 1962. – 135 с.
38. Markov O. I. Computer Simulation of the Load Characteristics of Low-Temperature Thermoelectric Coolers // Technical Physics Letters. – 2004. – Vol. 30, № 30. – P. 532-534.
39. Markov O. I. On optimization of the Charge Carrier Concentration in a Cooling Thermoelectric Branch // Technical Physics. – 2005. – Vol 50, No 6. – P. 805-806.
40. Suzuki, Ryosuke O.; Tanaka, Daisuke. Mathematical Simulation on Power Generation by Roll Cake Type of Thermoelectric Cylinders // Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006 – P. 305 – 310.
41. Lopez A., Villasevil F., Pindado R., Noriega G., Platzek D. Determination of a Mathematical Discrete Model for the Study of Thermoelectric Materials with the Use of the Microprobe // Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006. – P.296 – 299.
42. Rodriguez A., Vian J.G., Astrain D. Design and Thermal Analysis of components in a thermoelectric finger ice-maker incorporated in a domestic refrigerator // 6th European Conference on Thermoelectrics –Paris, France. – 2008.
43. Rodriguez A., Vian J.G., Astrain D. Numerical modelization by finite differences of a thermoelectric refrigerator device of “double jump”. Experimental validation. // 5th European Conference on Thermoelectrics. – Odessa, Ukraine – 2007.
44. Okumura H., Yamaguchi S., Nakamura H., Ikeda K., Sawada K. Numerical Computation of Thermoelectric and Thermomagnetic Effects // Proceedings ICT, 98. XVII International Conference Thermoelectrics. Nagoya, Japan. – 1998. – P. 89 - 92.
45. Itoh T., Muto T., Kitagawa K. Perfomance of Segmented Thermoelectric Elements Fabricated by Simultaneous Sintering Method // Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006. – P. 623-626.
46. Muller E., Walczak S., Seifert W., Stiewe C. Karpinski, G. Numerical performance estimation of segmented thermoelectric elements // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 364- 369.
47. Эстербю О. Прямые методы для разреженных матриц. – / О. Эстербю, З. Златев. – М.: Мир., 1987. – 120 с.
48. Джордж А. Численное решение больших разреженных систем уравнений Пер. с англ. – / А. Джордж, Дж. Лю. – М.: Мир, 1984. – 333 с.
49. Liu G.R. Mesh Free Methods. – CRC Press. – 2003. – 693 p.
50. Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне / А.В. Скварцов // Вычислительные методы и программирование. – 2002. – Т.3. – №1. – С. 14 – 39.
51. Ruppert J. A Delaunay Refinement Algorithm for Quality 2-Dimensional Mesh Generation // Journal of Algorithms. – 1995. – Vol. 18, №3. – P. 548-585.
52. Liu G.R., Quek S.S. The Finite Element Method: A Practical Course. – Elsevier Science Ltd.,

2003. – 348 p.
53. Баландин М.Ю. Векторный метод конечных элементов. – / М.Ю. Баландин, Э.П. Шурина. – Новосибирск. – 2001. – 69 с.
 54. Lau P.G., Buist R.J. Calculation of thermoelectric power generation performance using finite element analysis // Proceedings ICT'97. XVI International Conference on Thermoelectrics. Dresden, Germany. – 1997. – P. 563 – 566.
 55. Antonova E.E., Looman D.C. Finite Element for Thermoelectric Device in ANSYS // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 215 – 218.
 56. Rodríguez A. Development and experimental validation of a computational model in order to simulate ice cube production in a thermoelectric ice-maker: Thesis doctor. – Pamplona, 2009.
 57. Multi-domain simulation of Lithium Polymer Battery // Ozen Engineering. – 2009.
 58. Soto M.A., Rama Venkatasubramanian. ANSYS-based detailed thermo-mechanical modeling of complex thermoelectric power designs // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 219 – 221.
 59. Rowe D.M. Thermoelectric Handbook // Kuznetsov V.I. Functionally Graded Materials for Thermoelectric Applications. – Taylor & Francis Group. – 2006.
 60. Peterson S.W., Strauss A. Simulation of a thermoelectric element using B-spline collocation methods // AIP Conf. Proc. – 1998. – Vol. 420. – P.1652-1658.
 61. Kuraishi M., Komine T., Teramoto T., Sugita R., Hasegawa Y. Numerical Analysis of Effective Thermal Conductivity in Microwire Array Element // Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006. – P. 582-585.
 62. Zhang Y., Bian Z., Shakouri A. Improved maximum cooling by optimizing the geometry of thermoelectric leg elements // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 248 – 251.
 63. Прыбыла А.В. КПД спирального прямоугольного анизотропного термоэлемента с учётом температурной зависимости кинетических коэффициентов // Термоэлектричество. – 2008. – №1. – С. 34-39.
 64. Кобылянский Р.Р. Компьютерное исследование поперечной термоЭДС в короткозамкнутых термоэлементах / Р.Р. Кобылянский // Термоэлектричество. – 2007. – №2. – С. 21 – 27.
 65. Jaegle M., Bartel M., Ebling D., Böttner A. Multiphysics simulation of thermoelectric systems // Proceedings ECT-2008. 6th European Conference on Thermoelectrics. Paris, France. – 2008. – O. 27.
 66. Junior Ch., Richter Ch., Tegethoff W., Lemke N., Köhler J. Modeling and Simulation of a Thermoelectric Heat Exchanger using the Object-Oriented Library TIL // Modelica Association. – 2008. – P. 437-445.
 67. Bechtold T, Rudnyi E.B., Korvink J. G. Dynamic Electro-Thermal Simulation of Microsystems // Journal of Micromechanics and Microengineering. – Vol. 15, № 15. – P. R13-R31(1).
 68. Bechtold T. Model Order Reduction of Electro-Thermal MEMS. – Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Fakultät für ANgewandte Wissenschaften der Albert-Ludwigs Universität Freiburg im Bresgau – 2005. – 202 p.
 69. Gad-el-Hak M. MEMS: Introduction and fundamentals // Kirby R., Karniadakis G., Mikulchenko O., Kartikeya M. Integrated Simulation for MEMS: coupling Flow-Structure-Thermal-Electrical Domains – Taylor & Francis Group. – 2006.
 70. Huesgen T., Kockmann N., Woias P. Design and Fabrication of a MEMS Thermoelectric Generator

- for Energy Harvesting // Sensors and Actuators A: Physical. – 2008. – Vol. 145-146. – P. 423-429.
71. Баландин М.Ю. Методы решения СЛАУ большой размерности. – / М.Ю. Баландин, Э.П. Шурина. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. – 70 с.
72. Jing Jang. Numerical Simulation of Thermoelectric phenomena in field activated Sintering. A Thesis Submitted to the Faculty of Drexel University. – 2004. – 154 p.
73. Galamba N., Nieto C.A. de Castro. Equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations of the thermal conductivity of molten alkali halides // The Journal of Chemical Physics. – 2007. – Vol. 126, № 20. – P. 204511-204521.
74. Kan C. E., Zhiping Y., Dutton R.W. Formulation of Macroscopic Transport Models for Numerical Simulation of Semiconductor Devices // VLSI Design. – 1995. – Vol. 3, № 2. – P. 211-224.
75. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method. // J. Amer. Stat. Assos. 44, № 247, 1949.
76. Владимиров В.С., Соболев И.М. Расчёт наименьшего характеристического числа уравнения Пайерлса методом Монте-Карло // Вычислит. математика. – 1958.- №3.
77. Замалин В.М.. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. – / В.М. Замалин, Г.Э. Норман, В.С. Филинов. – М.: Наука, –1977.
78. Астрахарчик Г.Е. Исследование фазовой диаграммы и физических свойств многочастичных систем методом Монте-Карло. – / Г.Е. Астрахарчик. – Троицк. – 2005. – (Дис. Канд. физ.-мат. наук.)
79. Essner O., Dollfus P., Galdin-Retailleau S., Saint-Martin J. Improved Monte Carlo algorithm of phonon transport in semiconductor nanodevices // Journal of Physics: Conference Series 92. – 2007. – 4 pp.
80. Pollock E. L. Path-integral computation of superfluid densities / E.L. Pollock, Ceperly D.M., // Phys Rev. B. – 1987. Vol. 36. – P. 8343.
81. Tian W., Yang R. Thermal conductivity modeling of compacted nanowire composites // J. Appl. Phys. – 2007. – Vol. 101, № 5. – p. 054320-054320-5.
82. Dubi Y. Ventra Di. Theory of non-equilibrium thermoelectric effects in nanoscale junctions // Nano Letters. – 2009. – Vol. 9, № 1. – P. 97-101.
83. Jeng M., Yang R., Chen G. Monte Carlo Simulation of Thermoelectric Properties of Nanocomposites // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 21-26.
84. Furukawa Sh., Ikeda D., Kazumitsu S. Thermomagnetic Power and Figure of Merit for Spin-1/2 Heisenberg Chain // Journal of the Physical Society of Japan. – 2005. – Vol. 74, № 12. – P. 3241-3247.
85. Ikeda, Kazuma Toshihisa, Yago, Matoba, Masanori. Mass anisotropy on the thermoelectric figure of merit and Seebeck coefficient // Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006. – P. 293-295.
86. Paulsson M., Datta S. Thermoelectric effect in molecular electronics. – 2003 // Physical Review B. – 2003. – Vol. 67, №24. – P. 122-126.
87. Nakamura H., Hatano N., Shirasaki R. Quantum Nerst Effect. // Foundations of quantum mechanics in the light of new technology ISQM. – Tokyo. – P. 121-127.
88. O'Dwyer M. F., Lewis R. A., Zhang C., Humphrey T. E. Efficiency in nanostructures thermionic and thermoelectric devices // Physical Review B. – 2005. – Vol. 72, №20. – P. 214-218.
89. Segal D. Thermoelectric Effect in Molecular junctions: a tool for revealing of transport mechanism // Physical Review B. – 2005. – Vol. 72, №16. – P. 23-31.
90. Rowe D.M. Thermoelectric Handbook // Bo Brummerstedt Iversen. Structural Studies of

- Thermoelectric Materials. – Taylor & Francis Group. – 2006.
91. Humphrey T.E., Linke H. Reversible thermoelectric nanomaterials // Physical Review Letters. – 2005. – Vol. 94, № 9. – P. 096601-096605.
 92. Zebarjadi M., Esfarjani K., Shakouri A. Nonlinear Peltier effect in semiconductors // Applied Physics Letters. – Vol. 91, № 12, d. 122104 (3 pages) (2007).
 93. Farhangfar Sh. Quantum size effects in solitary wires of bismuth // Physics Review. – 2007. – Vol. 76, № 20. – P. 205437-205442.
 94. Esfarjani K., Zebarjadi M., Shakouri A., Kawazoe Y. Thermoelectric properties of a nanocontact // Physical Review B. – 2004. – Vol. 73, № 8. – P. 212-216.
 95. Hicks L.D., Dresselhaus M.S. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit // Phys. Rev. – 1993. – Vol. 47, №19. – P.12727–12731.
 96. Maes C., Van Wieren Maarten H. Thermoelectric phenomena via an interacting particle system // Journal of physics. A, mathematical and general. – 2005. – Vol. 7, №5 –P. 1005-1020.
 97. Peterson M.R., Mukerjee S., Shastry S., Haerter J. Dynamical thermal response functions for strongly correlated one-dimensional systems // Physical Review. – 2007. – Vol. 76, № 12. – P. 125110-125124.
 98. Zemljic M.M., Prelovsek P. Thermoelectric power in one-dimensional Hubbard model // Physical Review. – 2004. – Vol. 71, № 8. – P. 085110- 085116.
 99. Кривцов А.М. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твёрдых тел / А.М. Кривцов, И.Б. Волковец, П.В. Ткачёв, В.А. Цаплин // Физика твёрдого тела. – 2004. – Т. 46. – № 6. – С. 1025-1030.
 100. Kaplan I.G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. — John Wiley & Sons Ltd. — 2006. — 375 p.
 101. Cahill D., Wayne K. Ford, Goodson K., Mahan G., Majumdar A., Maris H., Merlin R., Phillpot S. Nanoscale thermal transport // Journal of Applied Physics. – 2003, Vol. 93, №2. – P. 791-818.
 102. Hagelstein P.L., Kucherov Y. Models for the Thermal Diode Open-Circuit Voltage // Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 457-461.

Надійшла до редакції 06.09.2017

Анатычук Л.І. *ак. НАН України*,^{1,2}
Лусте О.Я. *доктор физ.-мат. наук*^{1,2}

¹Институт термоэлектричества, ул. Науки, 1,
Черновцы, 58029, Украина *e-mail: anatyach@gmail.com;*

²Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича,
ул. Коцюбинского 2, Черновцы, 58012, Украина
e-mail: anatyach@gmail.com

**МОДЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ
ДЕГРАДАЦИИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ И ПРИКОНТАКТНЫХ СТРУКТУР**

Проведен анализ современного состояния и перспектив физических и компьютерных моделей деградации термоэлектрических материалов и приконтактных структур. Разработана классификация имеющихся компьютерных технологий, рассмотрены актуальные направления их использования для исследования и разработки надежных термоэлектрических модулей. Библиография 102, Рис 16.

Ключевые слова: надежность, деградация, термоэлектрические материалы.

L.I. Anatyshuk^{1,2} *acad. National Academy of Sciences of Ukraine,*
O.J. Luste^{1,2} *Doctor Phys.-math. Sciences*

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1, Nauky str, Chernivtsi, 58029, Ukraine; *e-mail: anatysh@gmail.com;*

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsiubynskyi str.,
Chernivtsi, 58012, Ukraine, *e-mail: anatysh@gmail.com*

MODEL STUDIES OF DEGRADATION MECHANISMS OF THERMOELECTRIC MATERIALS AND NEAR-CONTACT STRUCTURES

Analysis of current status and prospects of physical and computer models of degradation of thermoelectric materials and near-contact structures is carried out. Classification of available computer technologies is developed, the relevant lines of their use for the research and development of reliable thermoelectric modules are considered. Bibliography 102, Fig. 16.

Key words: reliability, degradation, thermoelectric materials

References

1. Anatyshuk L.I. (2003). The law of thermoelectric induction and its application for extending the capabilities of thermoelectricity. *Proc. of 22nd International Conference on Thermoelectrics*. (La Grande Motte, France, 2003) (p.472 – 475).
2. Jaegle M. (2008). Simulating thermoelectric effects with finite element analysis using Comsol. *European COMSOL Conference - Oral Presentations*. (Hannover, Germany, November 04 – 06).
3. Kuz R.V. (2007). Vykrovoyi zonalno-neodnorodnyi termoelement [Eddy zone-inhomogeneous thermoelement]. *Candidate's thesis (Phys-Math)*. Chernivtsi [in Ukrainian]
4. Samarskii A.A., Mikhailov A.P. (2001). *Matematicheskoye modelirovaniye: Idei. Metody. Primery [Mathematical simulation: Ideas. Methods. Examples]*. Moscow: Fizmatlit [in Russian].
5. Hockney R., Eastwood J. (1987). *Kompiuternoye modelirovaniye metodom chastits [Computer simulation using particles]*. Moscow: Mir [Russian transl].
6. Ortega J., Poole W. (1986). *Vvedeniye v chislennyye metody integralnykh uravnenii [An introduction to numerical methods of solving differential equations]*. A.A.Abramov (Ed.). Moscow: Nauka [Russian transl].
7. Samarskii A.A. (1989). *Teoriya raznostnykh skhem [Theory of differential circuits]*. Moscow: Nauka [in Russian].
8. Sabonnadiere J.-C., Coulomb J.-L. (1989). *Metod konechnykh elementov i SAPR [Finite element*

- method and CAD*]. Moscow: Mir [Russian transl].
9. Shaidurov V.V. (1989). *Mnogosetochnyie metody konechnykh elementov [Finite-element multi-grid methods]*. Moscow: Nauka [in Russian].
 10. Mitchell P., Wait R. (1977). *Metod konechnykh elementov dlia uravnnenii s chastnymi proizvodnymi [Finite element method for equations with partial derivatives]*. Moscow: Mir [Russian transl].
 11. Zenkevich O., Morgan K. (1986). *Konechnyie elementy i approksimatsiia [Finite elements and approximation]*. Moscow: Mir [Russian transl].
 12. Iliin V.P. (2000). *Metody konechnykh raznostei i konechnykh obimov dlia resheniia ellipticheskikh uravnenii [Methods of finite differences and finite volumes for solving elliptical equations]*. Novosibirsk: IM SB RAS [in Russian].
 13. Shcherba A.A., Rezikina M.M. (2008). *Modelirovaniie i analiz elektricheskikh polei energeticheskikh ob'ektov [Simulation and analysis of electrical fields of energy objects]*. Kyiv: Naukova knyha [in Russian].
 14. Potter D. (1975). *Vychislitelnyie metody v fizike [Computational physics]*. Moscow: Mir [Russian transl].
 15. Frenkel D., Smit B. (2002). *Understanding molecular simulation. From algorithms to applications*. London: Academic Press.
 16. Anatyshuk L.I. (2003). *Termoelektrichestvo. Termoelektricheskie preobrazovateli energii [Thermoelectricity. Thermoelectric power converters]*. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity [in Russian].
 17. <http://www.ferrotec.com/technology/thermoelectric/thermalRef10.php>
 18. Hangos K., Cameron I. (2001). *Process modelling and model analysis*. London: Academic Press.
 19. Luste O.J. (2009). Computer technologies in thermoelectricity. *Proc. of XIII International Forum on Thermoelectricity* (Kyiv, Ukraine, 2009).
 20. Booch G. (1999). *Ob'ektno-orientirovannyi analiz i proektirovaniie s primerami prilozhenii [Object-oriented analysis and design with applications]*. (2nd ed.). Moscow: Binom Publ., Saint-Petersburg: Nevskii dialect [Russian transl].
 21. Anantram M.P., Lundstrom M.S., Nikonov D.E. (2008). Modeling of nanoscale devices. *Proc. of the IEEE*, 96(9), 1511 – 1550.
 22. Paulsson M. (2004). *Non equilibrium Green's functions for dummies: introduction to the one particle NEGF equations*. West Lafayette: School of Electrical & Computer Eng, Purdue Univ.
 23. Datta S. (2000). Nanoscale Device Modeling: The Green's Function Method. *Superlattices & Microstructures*, 28(4), 253 – 278.
 24. Sutmann G. (2002). Classical molecular dynamics. In: *Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms, Lecture notes*. Jülich: John von Neumann Institute for Computing.
 25. Lubich Ch. (2002). Integrators for quantum dynamics: A numerical analyst's brief review. In: *Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms, Lecture notes*. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing.
 26. Manthe U. (2002). Quantum molecular dynamics with wave packets. In: *Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms, Lecture notes*. Jülich: John von Neumann Institute for Computing.
 27. Kratzer P. (2009). Monte Carlo and kinetic Monte Carlo methods – a tutorial. In: *Multiscale simulation methods in molecular sciences – Lecture notes, NIC Series*. Jülich: Forschungszentrum Jülich.

28. Lewerenz M. (2002). Monte Carlo methods: overview and basics //http://www.fz-juelich.de/nic-series/ *Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms, Lecture notes*. Jülich: John von Neumann Institute for Computing.
29. Foulkes W.M.C. (2001). Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Rev. Mod. Phys.*, 73(1), 33 – 83.
30. Galler M. (2005). *Multigroup equations for the description of the particle transport in semiconductors*. Singapore: World Scientific Publishing.
31. Weib J.-P. (2006). *Numerical analysis of lattice Boltzmann methods for the heat equation on bounded interval*. Universität Karlsruhe (TH).
32. Jünger A. (2009). *Transport equations for semiconductors*. Heidelberg: Springer.
33. Luste O.J. (2003). Фізика вихрових термоелементів і вимірювальних приладів на їх основі [Physics of eddy thermoelements and measuring instruments on their basis]. *Doctor's thesis* (Phys.-Math). Chernivtsi [in Ukrainian].
34. Verzhbitskii V.M. (2005). Численні методи (лінійна алгебра і нелінійні рівняння): Учебное пособие для вузов [Numerical methods (linear algebra and nonlinear equations): Manual for higher educational institutions]. Moscow: ONIKS 21 Century Publ.
35. Golub G., Van Loan Ch. (1999). *Matrix computations*. Moscow: Mir.
36. Hogan T., Shih T. (2006). Modeling and characterization of power generation modules based on bulk materials. In: *Thermoelectric Handbook*. D.M.Rowe (Ed.) Taylor & Francis Group.
37. Burshtein A.I. (1962). *Фізическіе основи расчиота полупроводниковых термоелектрических устройств* [Physical basics for the calculation of semiconductor thermoelectric devices]. Moscow: Fizmatlit [in Russian].
38. Markov O. I. (2004). Computer simulation of the load characteristics of low-temperature thermoelectric coolers. *Technical Physics Letters*, 30 (30), 532 – 534.
39. Markov O. I. (2005). On optimization of the charge carrier concentration in a cooling thermoelectric branch. *Technical Physics*, 50(6), 805 – 806.
40. Suzuki, Ryosuke O., Tanaka, Daisuke. (2006). Mathematical simulation on power generation by roll cake type of thermoelectric cylinders. *Proc. of 25th International Conference on Thermoelectrics*. (Vienna, Austria, 2006) (p.305 – 310).
41. Lopez A., Villasevil F., Pindado R., Noriega G., Platzek D. (2006). Determination of a mathematical discrete model for the study of thermoelectric materials with the use of the microprobe. *Proc. of 25th International Conference on Thermoelectrics*. (Vienna, Austria, 2006) (p.296 – 299).
42. Rodriguez A., Vian J.G., Astrain D. (2008). Design and thermal analysis of components in a thermoelectric finger ice-maker incorporated in a domestic refrigerator. *Proc. of 6th European Conference on Thermoelectrics*. (Paris, France, 2008).
43. Rodriguez A., Vian J.G., Astrain D. (2007). Numerical modelization by finite differences of a thermoelectric refrigerator device of “double jump”. Experimental validation. *Proc. of 5th European Conference on Thermoelectrics*. (Odessa, Ukraine, 2007).
44. Okumura H., Yamaguchi S., Nakamura H., Ikeda K., Sawada K. (1998). Numerical computation of thermoelectric and thermomagnetic effects. *Proc. of XVII International Conference on Thermoelectrics*. (Nagoya, Japan, 1998) (p. 89 – 92).
45. Itoh T., Muto T., Kitagawa K. (2006). Performance of segmented thermoelectric elements fabricated by simultaneous sintering method. *Proc. of 25th International Conference on Thermoelectrics*. (Vienna, Austria, 2006) (p.623 – 626).
46. Muller E., Walczak S., Seifert W., Stiewe C. Karpinski, G. (2005). Numerical performance

- estimation of segmented thermoelectric elements. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC, USA, 2005) (p. 364 – 369).
47. Osterby O., Zlatev Z. (1987). *Priamnye metody dlia razrezhennykh matrits [Direct methods for sparse matrices]*. Moscow: Mir.
 48. George A., Lui J. (1984). *Chislennoie resheniie bolshikh razrezhennykh sistem uravnenii [Numerical solution of large sparse equation systems]*. Moscow: Mir [Russian transl].
 49. Liu G.R. (2003). *Mesh free methods*. CRC Press.
 50. Skvortsov A.V. (2002). Obzor algoritmov postroeniia trianguliatsii Delone [Overview of algorithms for constructing Delaunay triangulation]. *Vychislitelnyie Metody i Programirovanie*, 3(1), 14 – 39 [in Russian].
 51. Ruppert J. (1995). A Delaunay refinement algorithm for quality 2-dimensional mesh generation. *Journal of Algorithms*, 18(3), 548 – 585.
 52. Liu G.R., Quek S.S. (2003). *The finite element method: a practical course*. Elsevier Science Ltd.
 53. Balandin M.Yu., Shurina E.P. (2001). *Vektorny metod konechnykh elementov [Vector finite element method]*. Novosibirsk [in Russian].
 54. Lau P.G., Buist R.J. (1997). Calculation of thermoelectric power generation performance using finite element analysis. *Proc. of XVI International Conference on Thermoelectrics*. (Dresden, Germany, 1997) (p. 563 – 566).
 55. Antonova E.E., Looman D.C. (2005). Finite element for thermoelectric device in ANSYS. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC USA, 2005) (p. 215 – 218).
 56. Rodríguez A. (2009). *Development and experimental validation of a computational model in order to simulate ice cube production in a thermoelectric ice-maker: Doctor's thesis*. Pamplona.
 57. Multi-domain simulation of lithium polymer battery. Ozen Engineering, 2009.
 58. Soto M.A., Venkatasubramanian Rama. (2005). ANSYS-based detailed thermo-mechanical modeling of complex thermoelectric power designs. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC USA, 2005) (pp. 219 – 221).
 59. Kuznetsov V.I. (2006). Functionally graded materials for thermoelectric applications. *In: Thermoelectric Handbook*. D.M.Rowe (Ed.) Taylor & Francis Group.
 60. Peterson S.W., Strauss A. (1998). Simulation of a thermoelectric element using B-spline collocation methods. *AIP Conf. Proc.*, 420, 1652 – 1658.
 61. Kuraiishi M., Komine T., Teramoto T., Sugita R., Hasegawa Y. (2006). Numerical analysis of effective thermal conductivity in microwire array element. *Proc. of 25th International Conference on Thermoelectrics*. (Vienna, Austria, 2006) (p.582 – 585).
 62. Zhang Y., Bian Z., Shakouri A. (2005). Improved maximum cooling by optimizing the geometry of thermoelectric leg elements. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC USA, 2005) (p. 248 – 251).
 63. Prybyla A.V. (2008). KPD spiralnogo priamougolnogo anisotropnogo termoelementa s uchiotom temperaturnoi zavisimosti kineticheskikh koeffitsientov [The efficiency of spiral rectangular anisotropic thermoelement with regard to temperature dependence of kinetic coefficients]. *Termoelektrichestvo – J.Thermoelectricity*, 1, 34 – 39 [in Russian].
 64. Kobylanskii R.R. (2007). Kompiuternoie issledovaniie poperechnoi termoEDS v korotkozamknutykh termoelementakh [Computer research on transverse thermoEMF in short-circuited thermoelements]. *Termoelektrichestvo – J.Thermoelectricity*, 2, 21 – 27 [in Russian].
 65. Jaegle M., Bartel M., Ebling D., Böttner A. (2008). Multiphysics simulation of thermoelectric

- systems. *Proc. of 6th European Conference on Thermoelectrics*. (Paris, France, 2008).
66. Junior Ch., Richter Ch., Tegethoff W., Lemke N., Köhler J. (2008). Modeling and simulation of a thermoelectric heat exchanger using the object-oriented library TIL. *Modelica Association*, 437 – 445.
 67. Bechtold T, Rudnyi E.B., Korvink J. G. (2005). Dynamic electro-thermal simulation of microsystems. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15(11), R17 – R31.
 68. Bechtold T. (2005). Model order reduction of electro-thermal MEMS. *Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Fakultät für Angewandte Wissenschaften der Albert-Ludwigs Universität Freiburg im Bresgau*.
 69. Kirby R., Karniadakis G., Mikulchenko O., Kartikeya M. (2006). Integrated simulation for MEMS: coupling flow-structure-thermal-electrical domains *In: Gad-el-Hak M. MEMS: Introduction and fundamentals*. Taylor & Francis Group.
 70. Huesgen T., Kockmann N., Woias P. (2008). Design and fabrication of a MEMS thermoelectric generator for energy harvesting. *Sensors and Actuators A: Physical*, 145-146, 423 – 429.
 71. Balandin M.Yu., Shurina E.P. (2000). *Metody resheniia SLAU bolshoi razmernosti [Methods for solving higher-dimensional linear algebraic equations]*. Novosibirsk: NSTU [in Russian].
 72. Jing Jang. (2004). Numerical simulation of thermoelectric phenomena in field activated sintering. *A Thesis Submitted to the Faculty of Drexel University*.
 73. Galamba N., Nieto C.A. de Castro. (2007). Equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations of the thermal conductivity of molten alkali halides. *The Journal of Chemical Physics*, 126 (20), 204511 – 204521.
 74. Kan C. E., Zhiping Y., Dutton R.W. (1995). Formulation of macroscopic transport models for numerical simulation of semiconductor devices. *VLSI Design*, 3(2), P. 211 – 224.
 75. Metropolis N., Ulam S. (1949). The Monte-Carlo method. *J. Amer. Stat. Assos.*, 44 (247).
 76. Vladimirov V.S., Sobol I.M. (1958). Raschiot naimenshego kharakteristicheskogo chisla uravneniia Paierlsa metodom Monte-Carlo [Calculation of the least characteristic number of the Peierls equation by the Monte-Carlo method. *Vychislitelnaia matematika – Computational mathematics*, 3.
 77. Zamalin V.M., Norman G.E., Filinov V.S. (1977). *Metod Monte-Carlo v statisticheskoi termodinamike [Monte-Carlo method in statistical thermodynamics]*. Moscow: Nauka [in Russian].
 78. Astrakharchik G.E. (2005). Issledovaniie fazovoi diagrammy i fizicheskikh svoistv mnogochastichnykh system metodom Monte Carlo [Research on phase diagram and physical properties of multi-particle systems by Monte Carlo method]. Candidate's thesis (Phys-Math). Troitsk [in Russian].
 79. Essner O., Dollfus P., Galdin-Retailleau S., Saint-Martin J. (2007). Improved Monte Carlo algorithm of phonon transport in semiconductor nanodevices. *Journal of Physics: Conference Series* 92.
 80. Pollock E. L., Ceperly D.M. (1987). Path-integral computation of superfluid densities. *Phys Rev. B*, 36, 8343.
 81. Tian W., Yang R. (2007). Thermal conductivity modeling of compacted nanowire composites. *J. Appl. Phys.*, 101(5), 054320 – 054320 – 5.
 82. Dubi Y. Ventra Di. (2009). Theory of non-equilibrium thermoelectric effects in nanoscale junctions. *Nano Letters*, 9(1), 97 – 101.
 83. Jeng M., Yang R., Chen G. (2005). Monte Carlo simulation of thermoelectric properties of

- nanocomposites. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC USA, 2005) (pp. 21 – 26).
84. Furukawa Sh., Ikeda D., Kazumitsu S. (2005). Thermomagnetic power and figure of merit for spin-1/2 Heisenberg chain. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(12), 3241 – 3247.
85. Ikeda, Kazuma Toshihisa, Yago, Matoba, Masanori. (2006). Mass anisotropy on the thermoelectric figure of merit and Seebeck coefficient. *Proc. of 25th International Conference on Thermoelectrics*. (Vienna, Austria, 2006) (p. 293 – 295).
86. Paulsson M., Datta S. (2003). Thermoelectric effect in molecular electronics. *Physical Review B*, 67(24), 122 – 126.
87. Nakamura H., Hatano N., Shirasaki R. (2005). Quantum Nernst Effect. *In: Proc. of ISQM Foundations of quantum mechanics in the light of new technology*. Tokyo (p.121 – 127).
88. O'Dwyer M. F., Lewis R. A., Zhang C., Humphrey T. E. (2005). Efficiency in nanostructures thermionic and thermoelectric devices. *Physical Review B*, 72(20), 214 – 218.
89. Segal D. (2005). Thermoelectric effect in molecular junctions: a tool for revealing of transport mechanism. *Physical Review B*, 72(16), 23 – 31.
90. Bo Brummerstedt Iversen. (2006). Structural Studies of Thermoelectric Materials. *In: D.M. Rowe. Thermoelectric Handbook*. Taylor & Francis Group.
91. Humphrey T.E., Linke H. (2005). Reversible thermoelectric nanomaterials. *Physical Review Letters*, 94 (9), 096601 – 096605.
92. Zebarjadi M., Esfarjani K., Shakouri A. (2007). Nonlinear Peltier effect in semiconductors. *Applied Physics Letters*, 91(12), 122104.
93. Farhangfar Sh. (2007). Quantum size effects in solitary wires of bismuth. *Physics Review*, 76(20), 205437 – 205442.
94. Esfarjani K., Zebarjadi M., Shakouri A., Kawazoe Y. (2004). Thermoelectric properties of a nanocontact. *Physical Review B*, 73(8), 212 – 216.
95. Hicks L.D., Dresselhaus M.S. (1993). Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit. *Phys. Rev.*, 47(19), 12727 – 12731.
96. Maes C., Van Wieren Maarten H. (2005). Thermoelectric phenomena via an interacting particle system. *Journal of Physics. A, mathematical and general*, 7(5), 1005 – 1020.
97. Peterson M.R., Mukerjee S., Shastry S., Haerter J. (2007). Dynamical thermal response functions for strongly correlated one-dimensional systems. *Physical Review*, 76(12), 125110 – 125124.
98. Zemljič M.M., Prelovšek P. (2004). Thermoelectric power in one-dimensional Hubbard model. *Physical Review*, 71(8), 085110- 085116.
99. Krivtsov A.M., Volkovets I.B., Tkachev P.V., Tsaplin V.A. (2004). Primeneniie metoda dinamiki chastits dlia opisaniia vysokoskorostnogo razrusheniia tverdykh tel [Application of the particle dynamics method for the description of high-speed destruction of solids]. *Fizika tverdogo tela – Physics of the Solid State*, 46(6), 1025-1030 [in Russian].
100. Kaplan I.G. (2006). *Intermolecular interactions: physical picture, computational methods and model potentials*. John Wiley & Sons Ltd.
101. Cahill D., Wayne K. Ford, Goodson K., Mahan G., Majumdar A., Maris H., Merlin R., Phillpot S. (2003). Nanoscale thermal transport. *Journal of Applied Physics*, 93(2), 791 – 818.
102. Hagelstein P.L., Kucherov Y. (2005). Models for the thermal diode open-circuit voltage. *Proc. of 24th International Conference on Thermoelectrics*. (Clemson, SC USA, 2005) (pp.457 – 461).

Submitted 06.09.2017