



Кругляк Ю.А.

Кругляк Ю.А.

Факультет информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, Одесса, 65016, Украина

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК, ТЕРМОТОК И ПОТОКИ ТЕПЛА В НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ: СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

Современная модель переноса электронов и тепла Ландауэра-Датты-Лундстрёма (ЛДЛ) резюмирована в [1]: Если зонная структура задана аналитически или численно, можно оценить число мод проводимости. Далее следует задаться моделью для средней длины свободного пробега. В итоге можно вычислить термоэлектрические транспортные коэффициенты для 1D, 2D и 3D проводников любого масштаба в баллистическом, квазibalлистическом или диффузионном режимах линейного отклика при наличии перепада напряжения и/или температуры на концах проводника. Далее обсуждаются следующие вопросы в концепции ЛДЛ: биполярная проводимость, теплопроводность массивных проводников, удельная теплота и теплопроводность, дебаевская модель, рассеяние фононов, зависимость решеточной теплопроводности от температуры, квантование теплопроводности. В приложении даются окончательные выражения для термоэлектрических транспортных коэффициентов через интегралы Ферми-Дирака для 1D, 2D и 3D проводников с параболической зонной структурой и для 2D графена с линейной дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах со степенным законом рассеяния.

Ключевые слова: нанoeлектроника, микроэлектроника, биполярная проводимость, теплопроводность, дебаевская модель, квазиравновесный транспорт, рассеяние фононов, квантование теплопроводности, термоэлектрические транспортные коэффициенты.

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

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

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

Введение

Современная модель транспорта электронов и тепла Ландауэра-Датты-Лундстрёма (ЛДЛ) изложена в [1]. Эта транспортная модель базируется на трех концепциях: моды проводимости $M(E)$, коэффициенты прохождения $T(E)$, фермиевское окно проводимости для электронов $(-\partial f_0/\partial E)$ и соответствующее выражение для фононов, пропорциональное $(-\partial n_0/\partial E)$, где $f_0(E)$ и $n_0(E)$ – равновесные значения функций Ферми и Бозе. Эти оконные функции ответственны за отбор тех электронных и фононных мод проводимости, которые только и дают вклад в электрический ток и поток тепла в режиме линейного отклика.

Мы обсудим следующие вопросы в рамках концепции ЛДЛ: биполярная проводимость, теплопроводность массивных проводников, удельная теплота и теплопроводность, дебаевская модель, рассеяние фононов, зависимость решеточной теплопроводности от температуры, квантование теплопроводности.

В конечном итоге, если известна или задана зонная структура проводника, можно вычислить число мод проводимости; если экспериментально определена или выбрана модель для среднего значения длины свободного пробега $\lambda(E)$, можно вычислить квазиравновесные транспортные коэффициенты используя приведенные в приложениях окончательные выражения для них через интегралы Ферми-Дирака для 1D, 2D и 3D проводников с параболической зонной структурой и для графена с линейной дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах со степенным законом рассеяния.

Биполярная проводимость

Рассмотрим 3D полупроводник с параболической дисперсией. Для зоны проводимости число мод проводимости

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

а для валентной зоны

$$M_{3D}^{(v)}(E) = g_v \frac{m_p^*}{2\pi\hbar^2} (E_V - E) \quad (E \leq E_V). \quad (16)$$

Удельная проводимость [1] обеспечивается двумя вкладками: от зоны проводимости

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

и от валентной зоны

$$\sigma_p = \frac{q^2}{h} \int_{-\infty}^{E_V} M_{3D}^{(v)}(E) \lambda_p(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (26)$$

Коэффициент Зеебека S_n для электронов в зоне проводимости следует из уравнений (66) в [1]:

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

$$\sigma'_n(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}^{(c)}(E - E_C) \lambda_n(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (36)$$

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

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

Аналогично, S_p для электронов в валентной зоне:

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

$$\sigma'_p(E) = \frac{2q^2}{h} M_{3D}^{(v)}(E_V - E) \lambda_p(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (46)$$

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

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

Однако, знак S_p будет положительным.

Что происходит, если вклад в проводимость дают обе зоны – и проводимости и валентной зоны? Это случается для узкозонных проводников или же при высокой температуре. В этом случае нужно просто интегрировать по всем модам:

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

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

Интегрировать по всей зоне проводимости и по всей валентной зоне нет нужды, поскольку фермиевская функция обеспечивает экспоненциальное затухание подынтегрального выражения по мере приближения к краям зон. Важно то, что в обоих случаях интегрировать нужно одно и то же выражение с соответствующими $M_{3D}(E)$ и $\lambda(E)$ в пределах выбранной разности $E_2 - E_1$. В обеих зонах ток переносится электронами. Наше общее выражение одно и то же как для зоны проводимости, так и для валентной зоны. Нет нужды изменять знаки для валентной зоны или $f_0(E)$ заменять на $1 - f_0(E)$.

Для вычисления коэффициента Зеебека с учетом вкладов от обеих зон вспомним, что в первой прямой форме транспортных коэффициентов (66) из [1] вклады от каждой моды суммируются так, что удельное значение коэффициента S_{ore}

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

тогда коэффициент Зеебека для биполярной проводимости

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

Поскольку коэффициенты Зеебека имеют противоположные знаки для зоны проводимости и для валентной зона суммарное значение коэффициента Зеебека существенно уменьшается при высоких температурах, а само термоэлектрическое устройство прекращает нормально функционировать.

Теплопроводность массивных проводников

Теплопроводность массивного диффузионного проводника является ключевым свойством материала проводника, которое контролирует функциональность любого электронного устройства. По аналогии с коэффициентом прохождения (39) в [1] для транспорта электронов фононное прохождение выражается таким же образом:

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

Также очевидно, что для крупных 3D проводников число фононных мод пропорционально площади поперечного сечения проводника:

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

Вернемся к уравнению (76) в [1], разделив и умножив его на A/L , что немедленно дает уравнение (69) там же для потока фоновонного тепла, лишь постулированного в [1]:

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

с удельной решеточной теплопроводностью

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

а подставляя (7) в (82) в [1] для удельной решеточной теплопроводности окончательно получаем:

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

Удобно ввести усредненное удельное число фоновонных мод (на единицу поперечного сечения проводника), принимающих участие в переносе тепла:

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

Тогда

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

где усредненная должным образом средняя длина свободного пробега определяется как

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

Таким образом, паре фоновонных транспортных уравнений (9) и (13) соответствует пара электронных транспортных уравнений:

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

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

Выражения для удельных теплопроводности (13) и для электрической проводимости (16) имеют одну и ту же структуру. Это всегда произведение соответствующего кванта

проводимости на удельное число соответствующих мод проводимости, участвующих в транспорте, и на должным образом усредненную среднюю длину свободного пробега. Мы далее обсудим эти три важных свойства фононного транспорта.

Пропорциональность удельной теплоты теплопроводности

Связь между удельной решеточной теплопроводностью и решеточной теплоемкостью при постоянном объеме хорошо известна [2 – 5]. Мы покажем сейчас, что соответствующий коэффициент пропорциональности есть произведение должным образом усредненной средней длиной свободного пробега $\langle\langle\Lambda_{ph}\rangle\rangle$ и усредненной скоростью фононов $\langle v_{ph}\rangle$, а именно:

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

Полная энергия фононов в единице объема

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

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

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

где были использованы уравнения (74) и (81) из [1]. Далее умножим и разделим (11) на (19) и получим искомую пропорциональность:

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

Получим окончательное выражение (17) и тем самым дадим корректную физическую интерпретацию коэффициента пропорциональности в уравнении (20). Для этого нам нужно вернуться к уравнению (7). Это выражение для коэффициента прохождения легко вывести для 1D проводника с учетом лишь нескольких простых и приемлемых допущений. Несмотря на казалось бы ограниченную применимость, на практике оно отлично работает для проводников любой размерности. Вывод уравнения (7) опирается на интерпретацию средней длины свободного пробега $\lambda(E)$ или $\lambda(\hbar\omega)$ как на обратное значение вероятности

(на единицу длины) того, что поток частиц в положительном направлении обращается в поток в противоположном направлении. Именно по этой причине величину λ надо бы называть и часто называют средней длиной свободного рассеяния назад (mean-free-path for backscattering) вместо привычного и не совсем корректного – средней длиной свободного пробега. Увяжем величину λ с временем рассеяния τ . Это легче всего сделать на примере 1D проводника. Пусть частица совершает акт рассеяния. Для изотропного рассеяния в 1D проводнике электрон может рассеяться вперед или назад. Только рассеяние назад существенно для среднего пути свободного пробега, так что время между двумя последовательными рассеяниями назад есть 2τ . Таким образом, средняя длина свободного рассеяния назад есть удвоенная средняя длина рассеяния:

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

Показано [6], что корректное определение средней длины свободного рассеяния назад для проводников любой размерности есть

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

где усреднение выполняется по углам. Для изотропных зон

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

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

Для времени рассеяния часто используется степенной закон рассеяния

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

в котором показатель степени s идентифицирует разные механизмы рассеяния: для рассеяния акустических фононов в 3D проводнике с параболической дисперсией $s = -1/2$, а для рассеяния на заряженных примесях $s = +3/2$ [7].

Аналогичный степенной закон часто используется и для среднего пути свободного пробега:

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

Для параболической зонной структуры $v(E) \propto E^{1/2}$, так что $r = s + 1/2$ с $r = 0$ для рассеяния на акустических фононах и $r = 2$ для рассеяния на заряженных примесях.

Возвращаясь к нашей первоначальной задаче вывести (17) из (20), в соответствии с

(21в) имеем:

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

а с учетом (21а),

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

и окончательно

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

Согласно (18) из [1], для 3D проводника число мод проводимости для электронов связано с плотностью состояний:

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

Перепишем эту формулу применительно к фононам. Помним, что вырождение электронов по спину $g_s = 2$ учитывается в плотности состояний:

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

а для сферических зон в 3D проводнике

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

Собирая вместе (27) – (29) для случая фононов имеем

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

Подстановка (26) и (30) в (20) дает

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

Умножая и деля (31) на

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

мы окончательно получаем искомое уравнение (17) с коэффициентом пропорциональности между κ_L и C_V в виде произведения усредненной должным образом средней длины

сводного пробега

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

и средней скорости

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

также должным образом усредненной.

Уравнение (17) часто используется для оценки средней длины сводного пробега по экспериментально измеренным κ_L и C_V , если нам известна средняя скорость, под которой обычно подразумевают продольную звуковую скорость. Приведенный нами вывод дает точное определение таких понятий как $\langle\langle\Lambda_{ph}\rangle\rangle$ и $\langle v_{ph} \rangle$. Выбрав фононную дисперсию, среднюю скорость всегда можно рассчитать согласно (34), и вычисленная таким образом скорость обычно сильно отличается от продольной составляющей скорости звука. В целом можно утверждать, что оценки среднего значения длины свободного пробега могут быть ошибочны, если опираться на продольную звуковую скорость [8].

Дебаевская модель

Различают три состояния поляризации решеточных колебаний: одно соответствует колебаниям атомов в том же направлении, в котором распространяются колебания – продольные моды (longitudinal/L), а другое – в направлении, перпендикулярном к тому, в котором распространяются колебания – поперечные моды (transverse/T). Есть еще третий тип мод (flexural/Z), соответствующих колебаниям в направлении, перпендикулярном одновременно обеим модам L и T. Низкоэнергетические моды называют акустическими (acoustic/A). Одна из них – мода LA соответствует звуковой волне. Вблизи $q \rightarrow 0$ дисперсии мод LA и TA линейные:

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

что известно как дебаевское приближение. Дебаевская скорость v_D есть скорость, усредненная по двум модам – LA и TA. В случае моды LA скорость v_D есть просто скорость звука $v_s \propto m^{-1/2}$, где m – эффективная масса колеблющегося атома. Типичное значение $v_s \approx 5 \times 10^3$ м/с, что раз в 20 меньше скорости электрона.

Типичная ширина зоны BW электронной дисперсии $BW \gg kT$, так что заняты только состояния вблизи дна зоны проводимости, где неплохо работает модель эффективной массы. Для фононов ситуация существенно иная. Ширина зоны $BW \approx kT$, так что заняты все состояния в зоне Бриллюэна. Широкоиспользуемое дебаевское приближение (35) хорошо описывает фононные акустические ветви если только q не сильно удаляется от центра зоны Бриллюэна.

В дебаевском приближении (35) плотность фононных состояний

$$D_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3(\hbar\omega)^2}{2\pi^2(\hbar v_D)^3}, [\text{Дж}^{-1} \cdot \text{м}^{-3}] \quad (36)$$

где тройка учитывает три моды поляризации. Тогда согласно (30) число фононных мод на единицу площади поперечного сечения

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

Поскольку все состояния в зоне Бриллюэна стремятся быть занятыми при умеренных температурах, мы уверены, что учли все состояния. В кристалле на единицу объема приходится $3N/\Omega$ состояний. Чтобы найти полное число состояний нужно проинтегрировать плотность состояний

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

с верхним пределом \hbar , умноженным на так называемую дебаевскую частоту, чтобы получить правильное число состояний, а именно:

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

Дебаевская частота определяется как частота, выше которой состояния уже не учитываются. Это ограничение можно также учесть через граничный волновой вектор q_D или через дебаевскую температуру

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

Для температуры $T \ll T_D$ заняты только состояния с $q \rightarrow 0$, для которых дебаевское приближение достаточно приемлемо.

Теперь можем вычислить решеточную теплопроводность путем интегрирования (11) до граничной дебаевской энергии:

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

с учетом $M_{ph}(\hbar\omega)$ согласно (37). Этот интеграл можно взять численно или же аналитически, если использовать подходящее выражение для фоновой длины свободного пробега. Именно так впервые была вычислена решеточная теплопроводность [9, 10]. Теория и вычислительные методы расчета термоэлектрических транспортных коэффициентов были далее развиты в [6, 8, 11].

Рассеяние фононов

Фононы рассеиваются на дефектах, примесных атомах, изотопах, на поверхностях и границах, на электронах и на других фононах. Фонон-фононное рассеяние обязано тому, что потенциальная энергия связей в кристалле не является строго гармонической. Принято все более высокие степени смещений учитывать в качестве потенциала рассеяния. Рассматриваются обычно два типа фононного рассеяния. В обычном процессе два фонона взаимодействуя порождают третий фонон, при этом импульс и энергия сохраняются:

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

Полный импульс ансамбля фононов сохраняется. Этот тип рассеяния практически не сказывается на потоке тепла.

Есть второй типа рассеяния (umklapp/U) когда импульс при взаимодействии двух исходных фононов не сохраняется и результирующий фонон в результате ангармоничности фонон-фононного и электрон-фононного взаимодействий имеет столь большой импульс, что он оказывается за пределами зоны Бриллюэна. Именно U-процессы обеспечивают перенос тепла особенно при высоких температурах. Важную роль играют также рассеяния на дефектах (defects/D) и на границах (boundaries/B). Скорости рассеяния складываются, так что суммарная скорость рассеяния

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

или, что аналогично, через длины свободного пробега (24)

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

Изучены закономерности для разных классов рассеяния [12]. Для рассеяния на точечных дефектах

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

известном как релеевское рассеяние.

В случае рассеяния на границах и поверхностях

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

где L есть наименьшее измерение рассеивающей области.

Для U-рассеяния обычно используется скорость

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

Этих сведений достаточно, чтобы объяснить температурную зависимость решеточной теплопроводности.

Температурная зависимость решеточной теплопроводности

Зависимость решеточной теплопроводности κ_L от температуры проиллюстрируем на примере массивного образца Si (рис. 1).

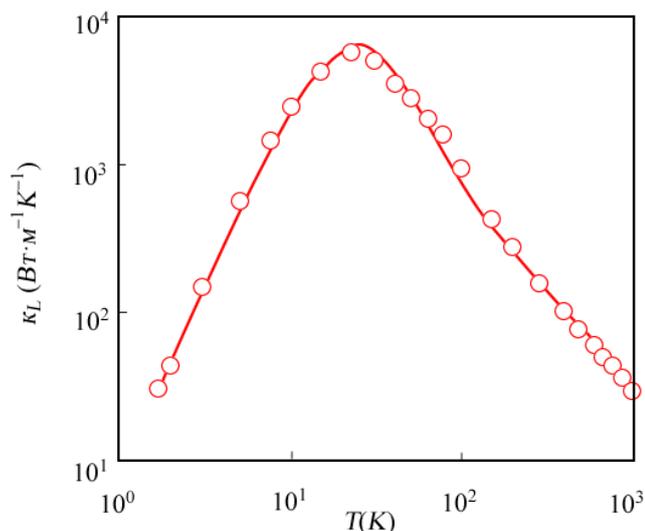


Рис. 1. Экспериментально измеренная [13] и рассчитанная [8] температурная зависимость решеточной теплопроводности κ_L массивного образца Si.

Согласно (13) κ_L пропорциональна числу заселенных фононных мод $\langle M_{ph} / A \rangle$ и усредненной должным образом средней длине свободного пробега фононов $\langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle$. Ход $\kappa_L(T)$ можно объяснить опираясь на зависимость $\langle M_{ph} \rangle$ и $\langle \langle \lambda_{ph} \rangle \rangle$ от температуры.

На основе уравнения (12) можно показать, что при низких температурах

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

так что первоначальный рост теплопроводности (рис. 1) связывают с тем обстоятельством, что число заселенных фононных мод быстро растет с температурой. При низких температурах важную роль играет рассеяние на граничных поверхностях. По мере роста температуры все больше генерируется коротковолновых фононов. Эти фононы рассеиваются на точечных дефектах и эти процессы рассеяния становятся все более и более важными. По мере приближения температуры к T_D заселяются все фононные моды и дальнейшее увеличение температуры уже не приводит к изменению $\langle M_{ph} \rangle$. Вместо этого повышение температуры инициирует все растущее U-рассеяние фононов, и теплопроводность начинает падать с дальнейшим увеличением температуры.

Различие между решеточной теплопроводностью и электрической проводимостью

Мы уже обращали на схожесть фононных транспортных уравнений (9) и (13) и электронных (15) и (16). Средние длины свободного пробега электронов и фононов одного порядка. Почему же тогда электрическая проводимость веществ варьирует по величине в широких пределах на много порядков, тогда как решеточная теплопроводность изменяется в пределах лишь нескольких порядков? Ответ кроется в фермиевских оконных функциях проводимости (79) и (81) из [1]. И для электронов и для фононов повышение температуры уширяет окна и увеличивает заселенность состояний. Для электронов, однако, положение фермиевского уровня существенно сказывается на величине оконной функции. Контролируя значение электрохимического потенциала, электрическую проводимость можно менять в широких пределах. В случае же фононов ширина окна определяется только температурой.

Еще одно существенное различие между электронами и фононами связано с тем, как заселены состояния. Когда $E_F \approx E_C$, электронные и фононные оконные функции весьма похожи. Однако же, в случае электронов ширина дисперсионных зон весьма значительна, так что заселена лишь небольшая часть зоны вблизи дна зоны проводимости: успешно работает приближение эффективной массы, легко получить аналитические решения. У фононов ширина дисперсионной зоны исключительно мала. При умеренных температурах все состояния в зоне Бриллюэна заселены: простые аналитические решения не работают, аналитические решения для решеточной теплопроводности получить невозможно.

Квантование решеточной теплопроводности

По аналогии с квантованием электронной проводимости

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

более 30 лет назад Дж. Пендри [14] пришел к выводу о существовании квантовых ограничений на поток тепла. Действительно, при $T \rightarrow 0$ в уравнении (82) работы [1] оконная функция $W_{ph}(\hbar\omega)$ резко заостряется и в пределе $\hbar\omega = 0$

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

Если для массивного проводника $M_{ph}(\hbar\omega) \rightarrow 0$ по мере того как $\hbar\omega \rightarrow 0$, то для нанорезисторов таких как нанопроволока или наноленты число фононных мод остается конечным. В случае баллистического транспорта $T_{ph} = 1$ и следует ожидать, что

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

Именно этот вывод был подтвержден экспериментально на 4-хмодовом резисторе при $T < 0.8K$ [15], так что этот выдающийся результат и последовавшие за ним измерения баллистической теплопроводности при сверхнизких температурах подтвердили ранее предсказанное квантование для 1D баллистических резисторов [16 – 18].

Квант теплопроводности

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

есть максимальная энергия, переносимая в пересчете на одну фононную моду. Удивительно, что квант теплопроводности не связан со статистикой частиц: он универсален и для бозонов и для фермионов и для аньонов [19 – 21].

Выводы

Основное заключение настоящей статьи и предыдущей [1] состоит в том, что модель Ландауэра-Датты-Лундстрема переноса электронов и тепла хорошо работает как для нано-, так и для микро- и макропроводников. Если зонная структура задана аналитически или численно, всегда можно оценить число мод проводимости, а при выбранной или установленной модели для среднего пути свободного пробега квазиравновесные термоэлектрические транспортные коэффициенты можно вычислить для проводников любой размерности и произвольного масштаба как в баллистическом, квазibalлистическом, так и в диффузионном режимах при наличии как разности потенциалов на концах проводника, так и разности температур.

В заключение мы собрали вместе полезные выражения для термоэлектрических коэффициентов через интегралы Ферми-Дирака как для полупроводников с параболической дисперсией, так и для графена с линейной дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах [22].

Приложение А. Термоэлектрические коэффициенты для 1D, 2D и 3D проводников с параболической зонной структурой в баллистическом и диффузионном режимах

Термоэлектрические коэффициенты выражены через интегралы Ферми-Дирака порядка j

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

в которых положение фермиевского уровня E_F относительно дна зоны проводимости E_C определяется безразмерным параметром

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

В приведенных выражениях термоэлектрические коэффициенты проводников в диффузионном режиме выписаны для степенного закона рассеяния

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

1. Термоэлектрические коэффициенты для 1D баллистических резисторов:

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

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

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

2. Термоэлектрические коэффициенты для 1D диффузионных резисторов:

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

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

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

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

Проводимость $G = \sigma_{1D} / L$ измеряется в *Сименсах*: $[\sigma_{1D}] = 1 \text{См} \cdot \text{м}$ и аналогично для других удельных коэффициентов: $s_T = S_T L$; $\kappa_0 = K_0 L$; $\kappa = K L$.

3. Термоэлектрические коэффициенты для 2D баллистических резисторов:

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

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

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

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

4. Термоэлектрические коэффициенты для 2D диффузионных резисторов:

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

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

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

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

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

Проводимость $G = \sigma_{2D} W / L$ измеряется в *Сименсах*: $[\sigma_{2D}] = 1 \text{См}$ и аналогично для других удельных коэффициентов: $s_T = S_T L / W$; $\kappa_0 = K_0 L / W$; $\kappa = K L / W$.

5. Термоэлектрические коэффициенты для 3D баллистических резисторов:

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

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

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

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

6. Термоэлектрические коэффициенты для 3D диффузионных резисторов:

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

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

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

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

Проводимость $G = \sigma_{3D} A / L$ измеряется в *Сименсах*: $[\sigma_{3D}] = 1 \text{ См} / \text{м}$ и аналогично для других удельных коэффициентов: $s_T = S_T L / A$; $\kappa_0 = K_0 L / A$; $\kappa = KL / A$.

Приложение Б. Термоэлектрические коэффициенты для графена с линейной дисперсией в баллистическом и диффузионном режимах

Графен является 2D проводником с уникальной линейной зонной структурой $E(k) = \pm \hbar v_F k$. Его транспортные коэффициенты рассчитаны по уравнениям (65) и (67) работы [1] с числом мод $M(E) = W \cdot 2 |E| / \pi \hbar v_F$. Используется такой же степенной закон рассеяния для диффузионного режима как и в Приложении А.

Проводимость $G = \sigma W / L$ измеряется в *Сименсах*: $[\sigma] = 1 \text{ См}$ и аналогично для других удельных коэффициентов: $s_T = S_T L / W$; $\kappa_0 = K_0 L / W$; $\kappa = KL / W$.

1. Баллистический режим:

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

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

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

$$K_0^{ball} = WT \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2kT}{\pi\hbar v_F} \right) \left(\frac{k}{q} \right)^2 \times \\ \times \left\{ 6[\mathfrak{S}_2(\eta_F) + \mathfrak{S}_2(-\eta_F)] - 4\eta_F [\mathfrak{S}_1(\eta_F) - \mathfrak{S}_1(-\eta_F)] + \eta_F^2 [\mathfrak{S}_0(\eta_F) + \mathfrak{S}_0(-\eta_F)] \right\}.$$

2. Диффузионный режим:

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

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

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

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

$$K_0 = WT \frac{2q^2}{h} \left(\frac{k}{q} \right)^2 \left(\frac{2kT}{\pi\hbar v_F} \right) \left(\frac{\lambda_0}{L} \right) \times \\ \times \left\{ \Gamma(r+4) [\mathfrak{S}_{r+2}(\eta_F) + \mathfrak{S}_{r+2}(-\eta_F)] - 2\eta_F \Gamma(r+3) [\mathfrak{S}_{r+1}(\eta_F) + \mathfrak{S}_{r+1}(-\eta_F)] + \right. \\ \left. + \eta_F^2 \Gamma(r+2) [\mathfrak{S}_r(\eta_F) + \mathfrak{S}_r(-\eta_F)] \right\}.$$

Литература

1. Ю.А. Кругляк, *J. Thermoelectricity*, N 6, 7 (2014).
2. Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела* (Высшая школа, Москва, 1974).
3. Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела* (Наука, Москва, 1978).
4. Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела*, тома 1 и 2 (Мир, Москва, 1979).
5. Л.И. Анатычук, *Термоэлектричество. Т. 1. Физика термоэлектричества* (Букрек, Черновцы, 2009).
6. С. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* 107, 023707 (2010).
7. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge University Press, Cambridge, 2012).
8. С. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* 109, 073718 (2011).
9. J. Callaway, *Phys. Rev.* 113, 1046 (1959).
10. M.G. Holland, *Phys. Rev.* 132, 2461 (1963).

11. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* 111, 093708 (2012).
12. C. Gang, *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford University Press, New York, 2005).
13. C.J. Glassbrenner and G.A. Slack, *Phys. Rev. A*, 134, 1058 (1964).
14. J.B. Pendry, *J. Phys. A*, 16, 2161 (1983).
15. K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, *Nature*, 404, 974 (2000).
16. D.E. Angelescu, M.C. Cross, and M.L. Roukes, *Superlatt. Microstruct.* 23, 673 (1998).
17. L.G.C. Rego, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.* 81, 232 (1998).
18. M.P. Blencowe, *Phys. Rev. B*, 59, 4992 (1999).
19. L.G.C. Rego, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B*, 59, 13080 (1999).
20. I.V. Krive, and E.R. Mucciolo, *Phys. Rev. B*, 60, 1429 (1999).
21. C.M. Caves, and P.D. Drummond, *Rev. Mod. Phys.* 66, 481 (1994).
22. R.S. Kim, *Physics and simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices* (Purdue University, West Lafayette, 2011).

Поступила в редакцию 21.11.2014