

УДК 621.3.019

Анатичук Л. И.^{1,2}, академик Национальной академии наук Украины
Лусте О. Я.^{1,2}, доктор физико-математических наук



Анатичук Л. И.

¹Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины, ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина, e-mail: anatysh@gmail.com

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



Лусте О.Я.

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.

Ключевые слова: надежность, деградация, термоэлектрические материалы.

Введение

Стремительное усовершенствование компьютерной техники и программного обеспечения открывает новые возможности исследования физических процессов в термоэлектрических материалах, приборах и устройствах. Компьютерные технологии все шире используются в термоэлектричестве [1]. Однако имеющийся их арсенал намного более широкий тех методов, которые уже нашли применение в этой области, как, например, методы конечных элементов и программные комплексы на их основе [2, 3].

Численный эксперимент стал одним из основных инструментов исследования [4]. Разработка и использование современных компьютерных технологий – одна из актуальных проблем моделирования в термоэлектричестве.

Одна из классификаций методов компьютерного моделирования приведена в работе [5], где рассмотрены:

- методы конечных разностей [6, 7],
- методы конечных элементов [8-11],
- методы конечных объемов [12, 13],
- моделирование методом частиц [5, 14, 15].

В процессе решения основных задач термоэлектричества [16], а именно генерирование электрической энергии, охлаждение/нагревание и создание сенсоров, приходится исследовать несколько полей разной природы на основе закона термоэлектрической индукции [1], рассматривать нелинейные модели, оптимизировать модели по многим параметрам,

исследовать надежность [17]. Для такого комплексного анализа возможно использование исключительно численных методов и современных компьютерных технологий на их основе.

Цель этой работы – провести анализ современных численных методов и компьютерных технологий на их основе, указать перспективные методы моделирования и численного анализа для решения задач термоэлектричества.

Общая классификация методов моделирования термоэлектрических приборов и материалов

Основные методы моделирования физических полей – сеточные методы. Они преимущественно используются для компьютерного моделирования макрообъектов. Для полного и всестороннего анализа термоэлектрических материалов и приборов на их основе необходимы универсальные и комплексные методы компьютерного моделирования.

На рис. 1 представлена схема общего подхода к компьютерному моделированию термоэлектрических объектов любой сложности на разных стадиях исследования, которая наглядно иллюстрирует взаимосвязь характерных длин и времен рассмотренных в компьютерных моделях физических процессов.

Термоэлектричество: От макро к нано

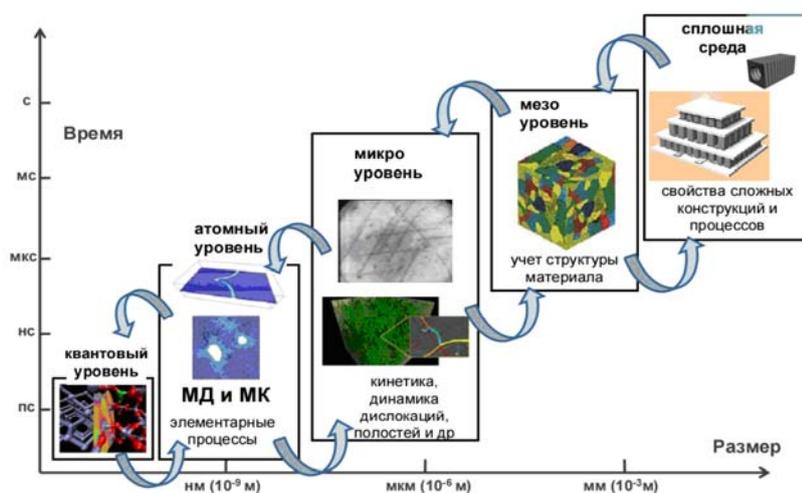


Рис. 1. Компьютерное моделирование в термоэлектричестве от макро до нано.

Общие принципы построения физических моделей на разных масштабах можно найти в [18]. Иерархия мультимасштабного моделирования, методы моделирования, которые применяются в термоэлектричестве [19] на основе объектно-ориентированного программирования [20], при разных характерных временах и длинах представлены на рис. 2.

Моделирование системы частиц с первых принципов (*ab initio*) на сегодня возможно, когда количество частиц не превышает 100. Применению метода функций Грина, а также других методов моделирования наноприборов посвящены работы [21-23]. Обзор квантовых и классических методов молекулярной динамики можно найти в [24-26]. Классическим методам Монте-Карло посвящено работы [27-28], обзор квантовых методов Монте-Карло представлен в работе [29].

Описанию детерминистического моделирования полупроводников на основе уравнения Больцмана посвящены монографии [30-32]. Феноменологическим моделям термоэлектрических приборов посвящено множество работ, в частности [16, 33].



Рис. 2. Иерархия методов моделирования.

2. Структурно-функциональное моделирование

Традиционно методы компьютерного моделирования разделяют на две большие группы, которые представлены на рис. 3.

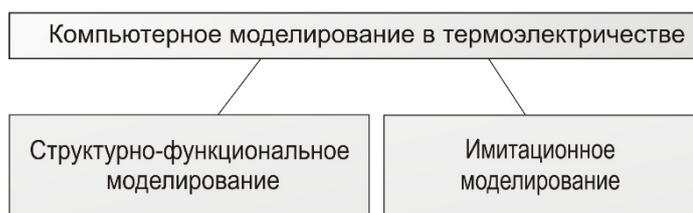


Рис. 3. Основные группы методов компьютерного моделирования в термоэлектричестве.

Первая группа – структурно-функциональное моделирование объектов, которые описываются с помощью систем дифференциальных или интегро-дифференциальных уравнений.

Классификация методов структурно-функционального моделирования представлена на рис. 4.



Рис. 4. Классификация методов структурно-функционального моделирования.

Другая группа – методы имитационного моделирования для систем многих тел будет рассмотрено ниже.

В большинстве случаев термоэлектрические модели сводятся к дифференциальным (интегро-дифференциальным) уравнениям. Также задачу можно сформулировать в вариационной постановке поиска оптимума функционала, который, в свою очередь сводится к системе дифференциальных уравнений, если это возможно. С помощью аналитических методов можно решить узкий класс задач, которые преимущественно искусственны и трудоемки.

Численным методам присуща универсальность, которая дает возможность решать задачи, для которых аналитическое решение невозможно или слишком трудоемко. Конечно-разностные методы встречаются чаще всего, и к этой группе методов можно отнести большинство известных численных методов. Методы конечных элементов – широко распространенные методы решения задач моделирования физических полей в геометрических областях произвольной формы. На рис. 4 представлены только наиболее известные из них – метод Рунге-Кутты и метод Галеркина. Метод конечных объемов используется редко, чаще всего в гидродинамике, иногда его не выделяют в отдельную группу.

3. Конечно-разностные методы

Метод конечных разностей (МКР) – простейший метод интерполяции, наиболее изученный и известный. Его суть состоит в замене бесконечно малых величин в дифференциальном уравнении конечными разностями искомых функций и переменных.

Основная идея метода состоит в том, что искомая непрерывная функция заменяется совокупностью приближенных значений в некоторых точках области – узлах. Совокупность узлов образует сетку. Для учета предельных условий строится система линейных/нелинейных (в случае коэффициентов, зависящих от независимых переменных) алгебраических уравнений относительно значений функции в узлах сетки. Полученная система решается одним из численных методов решения систем уравнений (Гаусса, релаксации, простой итерации, методами обращения, Якоби, Зейделя, прогона и т.д. [34]). Вопрос устойчивости таких схем обсуждаются в работе [35].

В случае рассмотрения моделей термоэлектрических приборов, в частности генераторов на основе термопарного термоэлемента [36], использованы несколько методов численного решения: точные, итеративные и методы усреднения. Рассмотрены одномерные стационарные уравнения для теплового потока и электрического тока. В качестве примера термоэлемента авторы выбрали термопарный термоэлемент в диапазоне температур $0 \div 900$ К. Результаты моделирования согласуются с классической аналитической теорией термопарного элемента [37]. МКР также использовались для исследования модели термоэлектрического охладителя [38], оптимизации концентрации носителей заряда в однодолинном полупроводнике [39]. На основе МКР исследовались термоэлектрический генератор рулонного типа [40], модели микронды для измерения потенциала в неизотермическом полупроводнике [41] и модели термоэлектрического холодильника [42, 43]. Разработана программа решения феноменологических уравнений, которые описывают эффекты Зеебека, Холла, Нернста, Пельтье, Эттингсгаузена и Риги-Ледюка для объектов разной геометрической формы [44], МКР применялись для исследования сегментных термоэлементов [45-46].

Методы конечных разностей используются практически во всех теоретических исследованиях как вспомогательный либо основной инструменты.

4. Методы конечных элементов (МКЭ)

4.1. Суть методов

Конечно-элементный анализ стал основным средством исследования во многих физических и инженерных задачах, в том числе и в термоэлектричестве. Свойства термоэлектрических приборов во многом зависят от геометрической формы компонентов прибора. Для моделирования физических полей разной сложности МКЭ-анализ дает универсальный и хорошо разработанный подход для решения прикладных задач термоэлектрического приборостроения.

Общая схема алгоритма решения задачи моделирования физического поля методом конечных элементов состоит из таких этапов [11]:

- дискретизация области решения;
- выбор интерполяции решения на конечном элементе;
- формирование базисных функций;
- подсчет погрешности дифференциальной задачи с использованием приближенного решения в виде рядов;
- формирование матриц жесткости для элементов, ортогонализация погрешности;
- ансамблирование матриц жесткости по элементам;
- учет предельных условий;
- решение системы алгебраических уравнений [47, 48].

На рис. 5 представлена общая схема моделирования термоэлектрических приборов с помощью алгоритмов МКЭ.

Вопрос генерирования конечно-элементной сетки обсуждается в работе [49]. Обзор методов триангуляции Делоне сделан в [50]. Рассмотрению алгоритма Рапперта, разработанного специально для МКЭ, посвящена работа [51]. Возможности построения конечно-элементной сетки для любой геометрической области, если как элементы избраны 2D-треугольники/3D-тетраэдры, обсуждаются в работе [52]. Технологическим аспектам применения векторных конечных элементов для решения уравнений Максвелла посвященная работа [53].

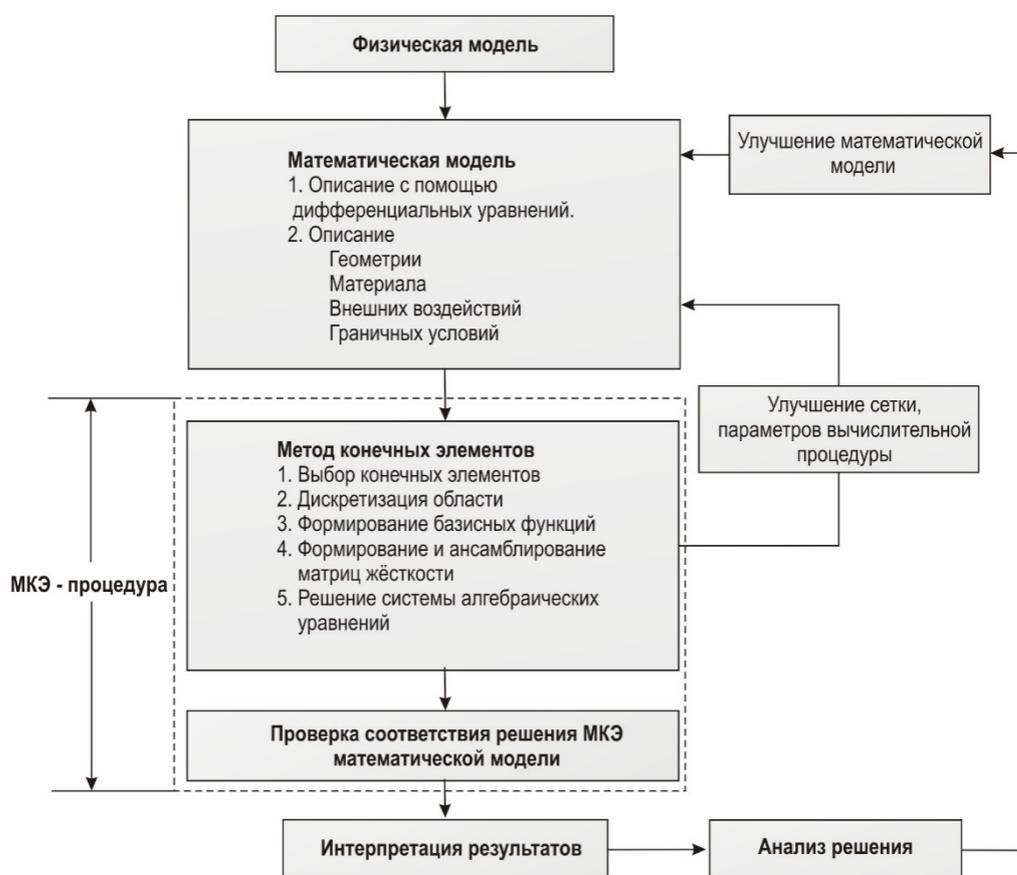


Рис. 5. Общая схема решения задачи методами конечных элементов.

Методы конечных элементов зарекомендовали себя, как универсальный инструмент исследования физических объектов и являются наиболее разработанными и универсальными.

Использование МКЭ для исследования термоэлектрических моделей

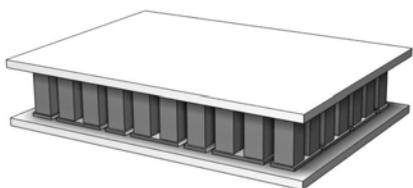


Рис. 6. Модель холодильника.

Методы конечных элементов широко используются для исследования термоэлектрических моделей. Если в работе [54] МКЭ рассматривается с одномерными элементами без учета контактного сопротивления с небольшим количеством итераций вследствие небольшой производительности компьютерной техники того времени, то в [55] рассматриваются трехмерные

стационарное и нестационарное моделирования однокаскадного и многокаскадного холодильников Пельтье с помощью программного комплекса ANSYS 9.0. Даже при таких условиях в [54] проводится сравнительный анализ МКЭ с методами усреднения. Авторы работы делают вывод о том, какой из МКЭ точнее и обеспечивает лучшую оптимизацию. Можно утверждать, что МКЭ – наиболее универсальный, точный и перспективный метод моделирования для термоэлектричества. В 2009 году появилась новая 12 версия ANSYS, которая содержит отдельный термоэлектрический модуль, в состав пакета вошли также новые модули, процесс создания геометрии модели стал значительно более простым, а также появился ряд новых усовершенствований. В частности, в работе [56] для моделирования термоэлектрических льдогенераторов бытовых холодильников применялся модуль ANSYS FLUENT, предназначенный для решения задач вычислительной гидро-газодинамики. Высокая производительность и точность этого модуля дали возможность учитывать эффекты, которые до этого не принимались во внимание, и осуществлять моделирование прибора в целом. Экспериментальные данные хорошо согласуются с моделью. Примеры использования новой версии пакета Ansys, в том числе его термоэлектрического модуля, можно найти на сайте [57].

МКЭ нашел свое применение во многих областях, таких как механика деформированного твердого тела, теплообмен, гидродинамика и электромагнитные поля, а в последние годы и термоэлектричество. На примере холодильника Пельтье и на основе классических уравнений термоэлектричества построена конечно-элементная схема для нахождения температурного распределения и профиля распределения электрического потенциала [55]. Авторы подчеркивают, что ANSYS дает возможность моделировать сопряженные поля и что этот программный пакет уже заполнил пробел, которым было термоэлектрическое моделирование. На рис. 6 представлена модель охладителя. Моделирование термоэлектрических устройств нуждается в учете не только электромагнитных и температурных полей, а и обусловленных ими явлений термоупругости и пьезоэффекта. Работа [58] посвящена моделированию термоэлектрического поля в устройстве SP-100 и минимизации всех видов деформации с помощью МКЭ и программного комплекса ANSYS.

В работе [59] представлен обзор функционально-градиентных материалов (ФГМ) – еще одного перспективного направления повышения термоэлектрической эффективности. Автор делает акцент на необходимости численного моделирования свойств ФГМ и их оптимизации. Экспериментальные данные очень хорошо согласуются с моделью, представленной феноменологическими уравнениями теплового баланса. Указывается на необходимость учета объемных эффектов Пельтье и Томсона и на возможность аппроксимации коэффициентов термоЭДС сплайнами. Сплайны использовались также для вычисления методом коллокации (один из видов МКЭ) термоЭДС разных термоэлектрических приборов [60]. Автор указывает на высокую точность МКЭ и согласованность теоретических расчетов с экспериментом. Таким образом, для решения задач термоэлектричества в случае их феноменологической постановки необходимо использовать крайинно-разностные методы и методы конечных элементов.

В работе [61] рассматривается микроматричный термоэлемент, смоделированный с применением 3D МКЭ. На основе законов сохранения энергии и заряда строится алгоритм решения для нахождения профиля температуры. С помощью МКЭ исследуется термоэлемент матричного вида, каждая из ветвей которого отделена от других стеклом, и в конце концов делается непонятный вывод о том, что коэффициент теплопроводности такой конструкции уменьшается, но выходная мощность не увеличивается.

Об еще одном применении трехмерного МКЭ и ANSYS речь идет в работе [62], в которой объект исследования – одновитковый термоэлемент Пельтье на основе Bi_2Te_3 . Исследуется контактный эффект. Авторы делают сравнительный анализ 3D-модели и одномерной модели. Площадь контакта охлаждающей поверхности в первом случае меньше, и результаты моделирования совпадают с одномерным моделированием. Таким образом, уменьшение площади контакта даже при равномерном распределении напряжения не дает выигрыша в температуре охлаждения. Только равномерное распределение тока по площади контакта дает снижение температуры охлаждения на 21%. Авторы отмечают, что техническая реализация такого условия нуждается в использовании матричной структуры точечных контактов и этим можно достичь произвольного распределения потенциала в каждой ячейке и обеспечить максимальное охлаждение некоторых участков.

На рис. 7 показана конечно-элементная сетка модели контакта. Эта работа еще раз подтверждает необходимость использования именно трехмерного моделирования для адекватного, наиболее полного описания и учета термоэлектрических эффектов.

Широкое использование ANSYS затенило другое окраинно-элементное программное обеспечение. Пакет Comsol Multiphysics в отличие от ANSYS дает возможность моделировать и исследовать без детального знания особенностей МКЭ.

Интуитивно понятный интерфейс дает возможность исследователю сосредоточить внимание именно на физической задаче, не задумываясь над проблемами собственно программирования и алгоритмизации. Относительно малая распространенность Comsol Multiphysics привела к отсутствию статей, пособий и описаний, посвященных этому программному пакету. Исключением являются работы Института термоэлектричества, в котором уже несколько лет ведется систематическое исследование термоэлементов с помощью МКЭ и программного пакета Comsol Multiphysics: исследование прямоугольного спирального анизотропного термоэлемента [62], короткозамкнутых термоэлементов [63]. На основе результатов моделирования разработана теория зонально-неоднородного термоэлемента [3].

Возможности Comsol Multiphysics для термоэлектричества описываются в работе [64], в которой приводятся 4 примера использования МКЭ для различных термоэлектрических приборов – холодильника и генератора. Для моделирования температурного и электрического полей используется PDE-форма (в частных производных) уравнений термоэлектричества. В статье описаны разные возможности МКЭ для моделирования термоэлектрических объектов, а также возможность создания моделей как стационарных, так и нестационарных с разными геометриями и полями разной природы. Примерами использования объектно-ориентированного программирования и МКЭ для создания моделей термоэлектрических генераторов и теплообменников есть работы [65, 66].

Применению МКЭ в микроэлектронике, исследованию термоэлектрических эффектов в МЭМС посвящены работы [67-70], разработан специализированный модуль more4ANSYS на

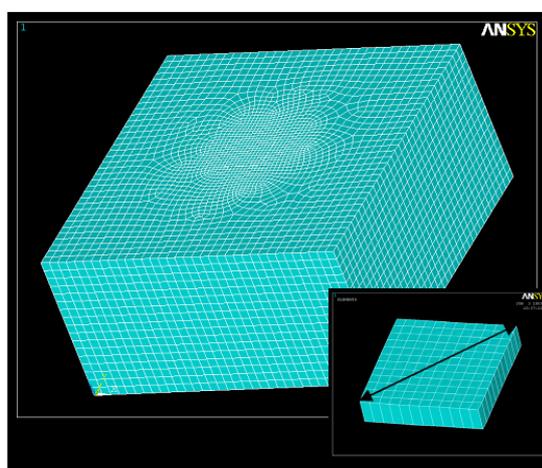


Рис. 7. Конечно-элементная сетка для контакта.

основе алгоритмов [71]. МКЭ также применялся для моделирования технологических процессов, в частности технологии спекания порошка [72].

Хотя моделирование и использование компьютерных технологий на основе МКЭ в термоэлектричестве широко распространено, оно несистематично или носит вспомогательный характер, не являясь основным методом исследования. Кроме того, на сегодня нет специализированного программного обеспечения для моделирования термоэлектрических явлений и приборов.

Таким образом, применение методов конечных элементов и компьютерных технологий на их основе открывает широкие возможности для исследования новых свойств термоэлектрических материалов, моделей и технологий. МКЭ – один из основных методов моделирования, который хорошо себя зарекомендовал, и является одним из наиболее перспективных методов компьютерного моделирования для термоэлектрического приборостроения.

Конечно-объемные методы

Метод конечных объемов широко используется в гидродинамике. В термоэлектричестве для ячеек с произвольным количеством граней (ребер) формулируются алгебраические соотношения, иногда существенно нелинейные и более похожие на формулы гидродинамики. В отличие от МКЭ и метода конечных разностей в них нет узловых определяющих параметров среды, предоставленное преимущество параметрам на ребрах и гранях.

Наличие трехмерных эффектов приводит к необходимости использовать метод конечных объемов, алгоритм которого можно разделить на такие этапы [36].

1. Определение управляющих уравнений:

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

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

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

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

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

с предельными условиями

$$T = T_0, \bar{q} = \bar{q}_0, \quad (6)$$

$$V = V_0, \bar{J} = \bar{J}_0.$$

Для нахождения стационарного решения предлагается рассматривать нестационарную систему дифференциальных уравнений

$$\frac{1}{\gamma_T} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\chi \nabla T) + f(T, U),$$

$$f(T, U) = p\bar{J}^2 - T\bar{J} \left[\frac{\partial \alpha}{\partial T} \nabla T + (\nabla \alpha)_T \right], \quad (7)$$

$$\frac{1}{\gamma_U} \frac{\partial U}{\partial t} = -\nabla \bar{J},$$

где γ_T и γ_U – параметры.

2. Дискретизация области. Область параллелепипеда разбивается на кубики.
3. Замена дифференциальных уравнений в частных производных алгебраическими уравнениями.
4. Алгоритм решения системы алгебраических уравнений.

Производные переменных заменяют конечными разностями, учитываются также предельные условия. Отдельно строится разностная схема на границе области, которая приводит к системе нелинейных алгебраических уравнений тридиагонального вида. При этом желательно использовать неявные методы решения системы дифференциальных уравнений, которые в этом случае дают абсолютную сходимость, в отличие от явных методов Адамса или Рунге-Кутты [7]. Делается вывод о том, какое трехмерное моделирование методом конечных объемов дает возможность установить новые эффекты и воссоздавать истинную картину процесса в отличие от классических методов численного решения дифференциальных уравнений.

Можно сделать вывод о том, какие конечно-объемные методы являются перспективными, но еще не адаптированными к термоэлектричеству средствами моделирования. Необходимы разработки специализированных алгоритмов и программного обеспечения для решения задач термоэлектричества.

Имитационное моделирование

Имитационное моделирование – это исследование математической модели в виде алгоритмов, которые воссоздают функционирование системы путем последовательного выполнения большого количества элементарных операций. Классификация методов имитационного моделирования для систем многих тел представлена на рис. 8.

Другой путь улучшения свойств термоэлектрических приборов – это улучшения параметров материалов и изобретение новых. Для моделирования свойств материалов используются методы Монте-Карло и молекулярной динамики [73, 74].

Этапы многоуровневого проектирования новых материалов на основе компьютерного моделирования представлены на рис. 8. Такой интегральный подход дает возможность проектировать новые материалы с заданными свойствами.



Рис. 8. Классификация методов имитационного моделирования.

Традиционно методы моделирования разделяют на основные группы в зависимости от размера моделируемой системы. Методы молекулярной динамики, Броуновской молекулярной динамики, гибридные методы и гидродинамическое моделирование можно обозначить одним термином – моделирование методом частиц.

Методы Монте-Карло. Общие свойства и классификация

Однозначного определения методов Монте-Карло нет, но можно утверждать, что методы Монте-Карло – это численные методы решения математических задач (систем алгебраических, дифференциальных, интегральных уравнений) и прямое статистическое моделирование (физических, химических, биологических, экономических, социальных процессов) с помощью получения и преобразования случайных чисел.

Первая работа, в которой систематически излагался метод Монте-Карло, опубликована в 1949 году Метрополисом и Уламом [75]. В ней метод Монте-Карло применялся для решения линейных интегральных уравнений. Работы по методам Монте-Карло стали активно публиковаться после Международной Женевской конференции по применению атомной энергии в мирных целях. Одной из первых была статья Владимирова и Соболя [76]. Монография [77] – первая систематическая работа, посвященная рассмотрению статистической теории неидеальных систем, основанной на изучении систем многих частиц.

Методы Монте-Карло разделяют на классические и квантовые. Выделяют также диффузный метод Монте-Карло [78].

Классические методы Монте-Карло для системы частиц основаны на стохастическом переборе точек фазового пространства с преобладающей выборкой тех областей, которые дают существенный вклад в интеграл:

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

где A – функция состояния системы; $H(\mathbf{R})$ – гамильтониан системы; $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ – задает одно состояние системы; $\mathbf{r}_i, i = \overline{1, N}$ – задает все степени свободы одной частицы; p – функция распределения; $Z = \int_{\Omega} p(H(\mathbf{R})) d\mathbf{R}$ – статистическая сумма. В соответствии с функцией распределения генерируется последовательность состояний в фазовом пространстве, вдоль которой вычисляется интеграл (8). При стремлении количества элементов последовательности к бесконечности можно получить точное значение среднего. В случае конечного числа элементов последовательности можно получить значение интеграла (8) точнее, чем обычными методами интегрирования.

Квантовые методы Монте-Карло применяются для моделирования квантовой системы многих тел, например, для решения уравнения Больцмана для системы фононов [79]. В основном группа этих методов применяется для интегрирования многомерных интегралов, которые возникают в процессе решения уравнения Шредингера:

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

Разные аспекты применения квантовых методов Монте-Карло рассмотрены в работах [31, 80].

Моделирование термоэлектрических наноприборов и материалов

В последнее время тема нанотехнологий стала очень популярной, в том числе и в термоэлектричестве [81-83], и методы Монте-Карло являются одним из инструментов моделирования и исследования свойств таких устройств и материалов.

Как отмечалось выше, еще одним подходом к моделированию термоэлектрических объектов являются статистические методы или методы Монте-Карло. В работе [84] представлен алгоритм Монте-Карло для моделирования термоэлектрических свойств нанокомпозитов. Рассмотрены как двумерные, так и трехмерные модели для изучения переноса фононов. Трехмерное моделирование дало высокие значения эффективной теплопроводности. Авторы отмечают, что размещенные случайным образом наночастицы дают теплопроводность очень близкую к тому случаю, когда частицы размещены периодически. Трехмерное моделирование выявляет новые эффекты и определяет другие термоэлектрические свойства. Метод Монте-Карло применяется также для вычисления нелинейного коэффициента Пельтье [85] для Ingaas. Числовые значения хорошо согласуются с аналитическими выражениями. Метод Монте-Карло является также одним из мощных средств решения уравнения Больцмана.

В работе [86] дается сравнительный анализ для двух моделей: аппроксимации времени релаксации для кинетического уравнения Больцмана и решения этого уравнения с помощью сферических гармоник. В результате исследования с учетом анизотропии эффективной массы сделан вывод, что в модели рассеяния электронного газа на ионизированных примесях влияние анизотропии эффективной массы на величину коэффициента Зеебека невелико. Даже с увеличением времени релаксации добротность материала не увеличивается.

Несколько работ посвящены теоретическому исследованию термоэлектрических эффектов молекулярной электроники [87-90]; исследована возможность создания наноструктурных термоэлектрических приборов [91] и новых материалов [92]; новые термоэлектрические эффекты [93, 94]; рассмотрены перспективы развития нанотехнологий в термоэлектричестве, в частности проведены исследования термоэлектрических свойств наноконтакта двух нанотрубок из Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 [95]. В работе [96] смоделированы необратимые эффекты в термоэлектрических наноматериалах на примере решетки из квантовых точек.

В работе [90] рассматривается термоэлектрический эффект в молекулярных соединениях. Исследуется модель металлический контакт-молекула-металлический контакт. На основе аналитических выкладок и численного моделирования показано, что термоэлектрический потенциал дает важную информацию о механизмах контроля движения электронов, включая слабое электрон-электронное взаимодействие и тепловое рассеяние. Показано, что при высоких температурах положение энергии Ферми относительно молекулярных состояний можно вывести из термоэлектрического потенциала. Термоэлектрическая мощность не зависит от материала, из которого сделаны контакты.

Методы Монте-Карло привлекательны для компьютерного моделирования в термоэлектричестве. Их использование приводит к лучшему пониманию происхождения термоэлектрических явлений, а это открывает возможности для создания и прогнозирования свойств новых термоэлектрических материалов.

Моделирование методом частиц

Моделирование методом частиц – относительно новый и мало разработанный в сравнении с МКЭ метод – в термоэлектричестве практически не использовался. Моделирование методом частиц состоит именно в имитации составляющих физического объекта. Описание моделей частиц в ячейке для термоэлектрических эффектов представлено в работе [97] для простейших геометрий (два провода). В качестве термоэлектрических материалов избраны металлы. Термоэлектрические явления рассматриваются как ансамбль частиц, а именно электронного газа. За состояния равновесия распределения удовлетворяет закон Ферми-Дирака. Рассматриваются эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона. Вычислительная модель, а также разработанная программа отсутствуют. В нескольких работах на основе формализма Кубо исследована одномерная модель Хаббарда [98, 99]. Вычислены основные кинетические коэффициенты – электропроводность, теплопроводность и коэффициент термоЭДС.

Хотя моделирование методом частиц используется в основном для исследования физико-химических свойств сплошных сред, оно находит свое применение и для решения механических задач сильного неупругого деформирования и разрушения [100]. В работе сделан обзор по моделированию методом частиц скоростного разрушения твердых тел. Рассмотрены

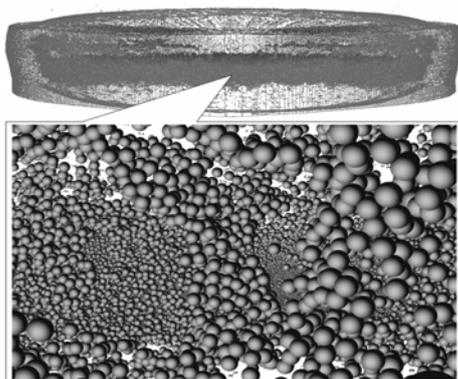


Рис. 9. Трехмерная модель откольного разрушения тела. Содержит 100 миллионов частиц.

конкретные задачи: пробивание препятствий ударником, который деформируется; разрушение пласта под действием сферической волны растяжения; откольное разрушение в случае плоского ударного взаимодействия пластин (рис. 9). Излагаются основные положения этого метода. В случае моделирования методом частиц не обязательно рассматривать физические частицы (электроны, ионы, молекулы), а можно рассматривать виртуальные макрочастицы, взаимодействие которых описывается некоторыми потенциалами [101]. Каждая частица имеет свои специфические свойства. Использование метода частиц не требует описания сложной теории, многие

эффекты появляются автоматически. В этом значительное преимущество именно имитационного моделирования. Но метод частиц требует большой производительности компьютеров, поскольку для адекватного моделирования необходимо большое количество частиц ($\sim 10^8$). Для реализации такой имитационной программы необходимы уже многопроцессорные мейнфреймы. Исследование деформаций – перспективное направление для исследования надежности термоэлектрических приборов.

Предметом обзора [102] является наномасштабный теплоперенос. Экспериментально изучена теплопроводность многих поверхностей раздела твердых тел, но диапазон наблюдаемых свойств намного уже предусмотренного теорией. Стремительное развитие микроэлектроники согласно закону Мура обусловило необходимость исследования свойств наноматериалов. Микроэлектронные устройства слишком велики для прямого моделирования на атомном уровне, поэтому основным методом моделирования является кинетическое уравнение Больцмана:

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

где $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ – поле внешних сил; $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ – функция распределения плотности в одночастичном фазовом пространстве; \mathbf{p} – импульс; \mathbf{x} – координата; m – масса, $\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll}$ – столкновительный член (интеграл столкновений).

Моделирование методом частиц – еще один перспективный метод компьютерного моделирования, открывающего возможности для выявления новых термоэлектрических эффектов и создания материалов с заданными свойствами.

Моделирование интенсивности отказов термоэлектрических модулей в режиме генерации

Как эффективный пример использования МКЭ и программного пакета Comsol Multiphysics приведем результаты исследования интенсивности отказов термоэлектрических модулей 3 типов ТЭС1 7107, ТЭС1 12715 и ТЭС1 12704 в интервале температур 80 – 280⁰С.

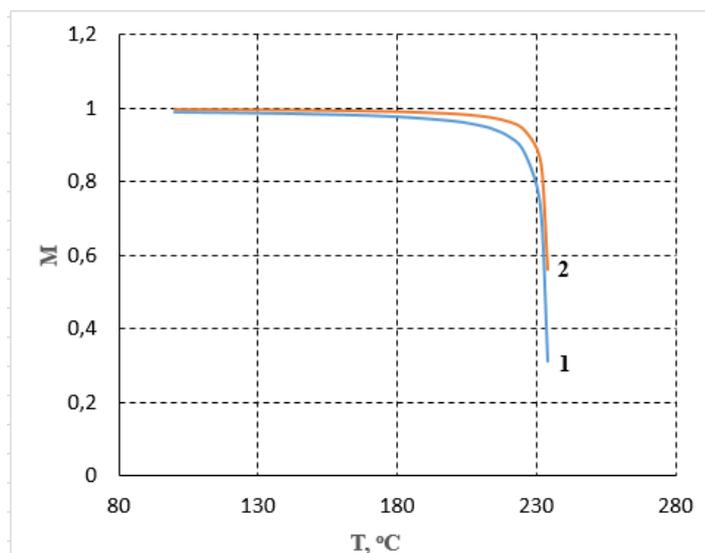


Рис. 10. Температурная зависимость интенсивности отказов, согласно теории надежности.
1 – тип ТЭС1 7107 и ТЭС1 12715; 2 – тип ТЭС1 12704.

Температурная зависимость интенсивности отказов M , согласно теории надежности, удовлетворяет с доверительной вероятностью $P = 0.9$ закону Аррениуса с точками Кюри для температуры плавления припоя. Для трех типов модулей эти зависимости приведены на рис. 10.

Учитывая приведенную температурную зависимость интенсивности отказов, по экспериментальным данным были получены зависимости убывания электрической мощности и КПД модулей в зависимости от времени наработки (рис. 11-16).

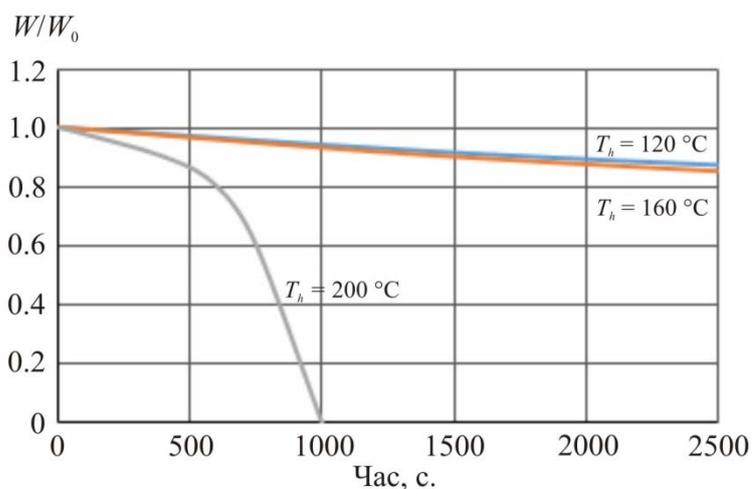


Рис. 11. Зависимость электрической мощности модулей типа ТЭС1 7107 от времени наработки (в часах).

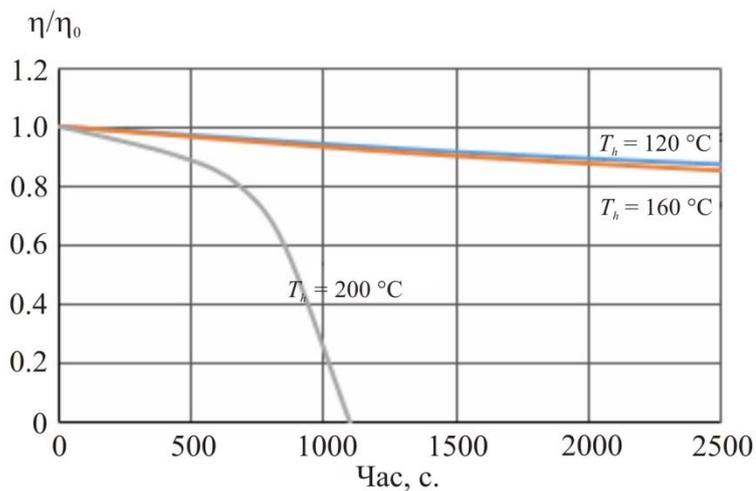


Рис. 12. Зависимость КПД модулей типа ТЭС1 7107 от времени наработки (в часах).

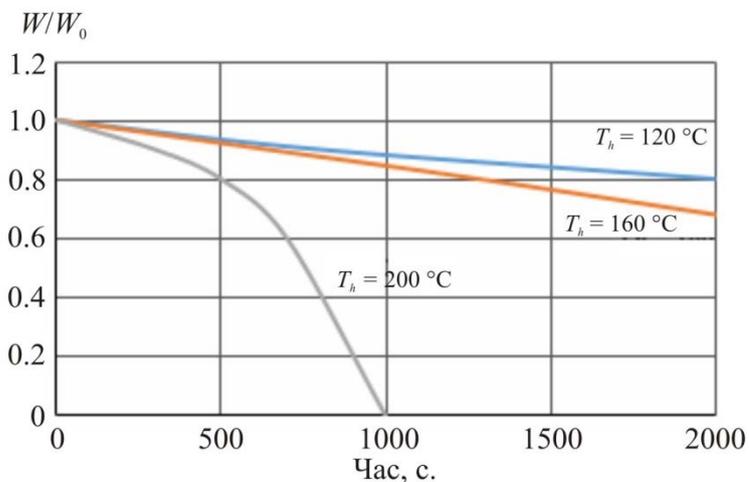


Рис. 13. Зависимость электрической мощности модулей типа ТЭС1 12704 от времени наработки (в часах).

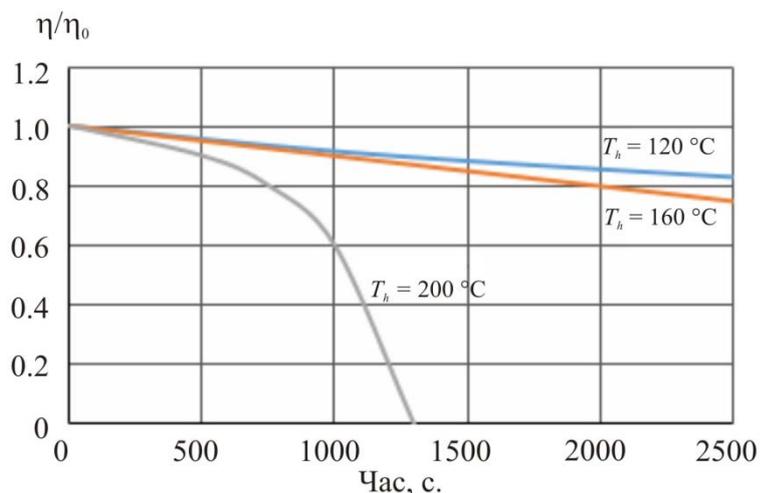


Рис. 14. Зависимость ККД модулей типа ТЭС1 12704 от времени наработки (в часах).

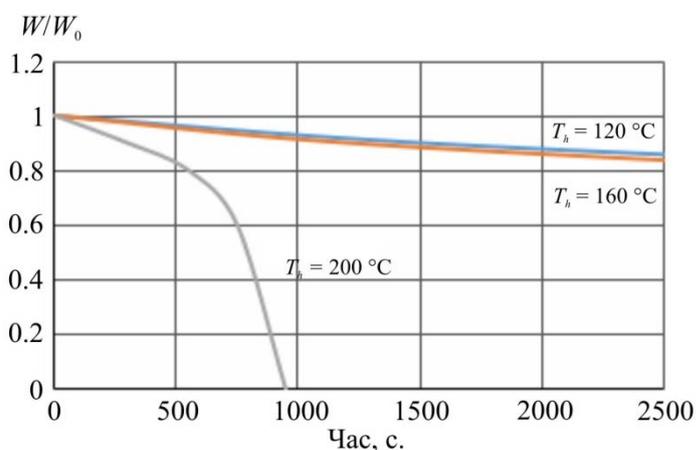


Рис. 15. Зависимость электрической мощности модулей типа ТЭС1 12715 от времени наработки (в часах).

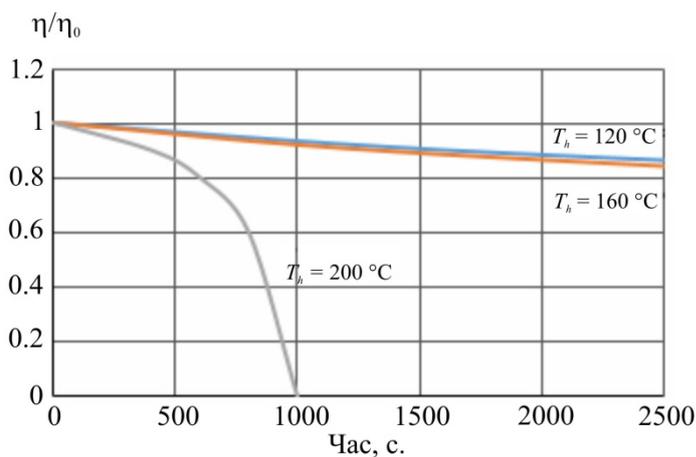


Рис. 16. Зависимость ККД модулей типа ТЭС1 12715 от времени наработки (в часах).

Выводы

1. Компьютерные технологии и осуществление вычислительных экспериментов – основной инструмент теоретического исследования термоэлектрических моделей.

2. Показано, что методы конечных элементов – наиболее разработанные и универсальные методы создания и исследования феноменологических моделей термоэлементов и термоэлектрических приборов.

3. Необходима разработка алгоритмов метода конечных элементов для термоэлектрических явлений, в частности векторного МКЭ и специализированного программного комплекса для моделирования термоэлектрических приборов.

4. Метод конечных объемов – перспективный метод моделирования физических полей, но на сегодня не применяется в термоэлектричестве. Необходима разработка алгоритмов МКЭ и программного обеспечения, реализующих этот метод.

5. Моделирование методом частиц и другие статистические методы моделирования перспективны для изучения, моделирования и выявления новых термоэлектрических эффектов и исследования уже известных.

6. Методы частиц, Монте-Карло и молекулярной динамики открывают возможности для проектирования новых термоэлектрических материалов с заданными свойствами. Необходима разработка алгоритмов, соответствующего программного обеспечения и моделей, реализующих метод частиц. Большие вычислительные трудности в случае использования метода частиц приводят к необходимости использования алгоритмов параллельных вычислений.

7. Основной вывод заключается в том, что все описанные модели термоэлектрических модулей являются детерминированными, и что до сих пор не рассмотрены возможности компьютерного моделирования случайных отказов термоэлектрических модулей. Все компьютеры оборудованы генераторами псевдослучайных чисел, что является мощным средством изучения случайных процессов детерминированными неслучайными компьютерами. Алгоритмы работы генераторов псевдослучайных чисел являются секретом фирм, который известен разве что компиляторам программ, написанных на языках высокого уровня. Уже доказана высокая эффективность исследования случайных процессов с помощью генераторов псевдослучайных чисел. Приходит время использования таких компьютерных программ для потребностей термоэлектричества.

Литература

1. Anatyhuk 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 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. Performance 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, SCUSA. – 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. MeshFreeMethods. – CRC Press. – 2003. – 693 p.
50. Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне / А.В. Скворцов // 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, SCUSA. – 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, SCUSA. – 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, SCUSA. – 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 Breisgau – 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, SCUSA. – 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, №^o5 –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, SCUSA. – 2005. – P. 457-461.

Поступила в редакцию 06.09.2017

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. Bibl. 102, Fig. 16.

Keywords: 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). Vykrovyyi 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). *Mnogosetochnyye metody konechnykh elementov [Finite-element multi-grid methods]*. Moscow: Nauka [in Russian].
10. Mitchell P., Wait R. (1977). *Metod konechnykh elementov dlia uravnenii s chastnymi proizvodnymi [Finite element method for equations with partial derivatives]*. Moscow: Mir [Russian transl].

11. Zenkevich O., Morgan K. (1986). *Konechnye elementy i approksimatsiia [Finite elements and approximation]*. Moscow: Mir [Russian transl].
12. Iliin V.P. (2000). *Metody konechnykh raznostei i konechnykh ob'ёмov 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., Rezinkina M.M. (2008). *Modelirovaniie i analiz elektricheskikh polei energeticheskikh ob'ektov [Simulation and analysis of electrical fields of energy objects]*. Kyiv: Naukovaknyha [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-orientovannyi 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](http://www.fz-juelich.de/nic-series/Quantum%20simulations%20of%20complex%20many-body%20systems%20from%20theory%20to%20algorithms,%20Lecture%20notes). 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 расчіота полупроводникових термоелектрических устроіств* [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). *Прямые методы для разреженных матриц* [Direct methods for sparse matrices]. Moscow: Mir.
48. George A., Lui J. (1984). *Численноіе решеніе болших разреженных систем уравненіи* [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 postroieniia triangulatsii 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). *Vektornyiy 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, SCUSA, 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, SCUSA, 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. Kuraishi 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, SCUSA, 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. Kobylanskiy 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 svoystv 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, SCUSA, 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. Zemljč 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). Primenenie 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, SCUSA, 2005) (pp.457 – 461).

Submitted 06.09.2017