

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСТВЕ

М.Н. Струтинский
(Институт термоэлектричества, Черновцы, Украина)



М.Н. Струтинский

-
- *Анализируется современное состояние и перспективы использования методов компьютерного моделирования в термоэлектричестве. Дана классификация существующих компьютерных технологий, рассмотрены актуальные направления использования компьютерных технологий для создания и исследования термоэлектрических моделей.*

Введение

Стремительное совершенствование компьютерной техники и программного обеспечения открывает новые возможности исследования физических процессов в термоэлектрических материалах, приборах и устройствах. Компьютерные технологии и сегодня используются в термоэлектричестве [1]. Однако имеющийся их арсенал намного обширнее 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 является одной из актуальных проблем моделирования в термоэлектричестве.

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

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

При решении основных задач термоэлектричества [16], а именно генерирования электрической энергии, охлаждения/нагрева и создания сенсоров, приходится исследовать несколько полей разной природы на основе закона термоэлектрической индукции [1], рассматривать нелинейные модели, оптимизировать модели по многим параметрам, исследовать надёжность [17]. Для такого комплексного анализа возможно использование исключительно численных методов и современных компьютерных технологий на их основе.

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

1. Общая классификация методов моделирования термоэлектрических приборов и материалов

Основными методами моделирования физических полей являются сеточные методы. Эти методы в основном 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 представлен общий подход к компьютерному моделированию

термоэлектрических объектов любой сложности на разных стадиях исследования, наглядно иллюстрирующий взаимосвязь характерных длин и времён рассматриваемых в компьютерных моделях физических процессов. 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 различных характерных временах и длинах представлены на рис. 2.

Моделирование системы частиц из первых принципов (*ab initio*) в настоящее время возможно не более чем для 100 частиц. Применение 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 посвящены работы [27-28], обзор квантовых методов Монте-Карло дан в работе [29].

Термоэлектричество: От макро к нано

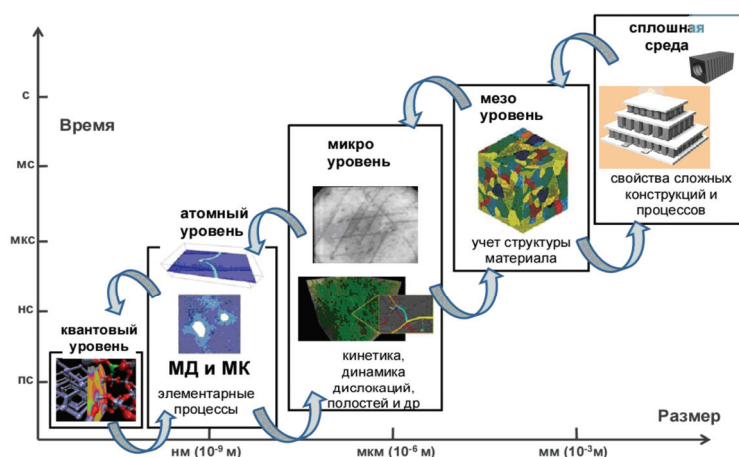


Рис. 1. Компьютерное моделирование в термоэлектричестве от макро к нано.

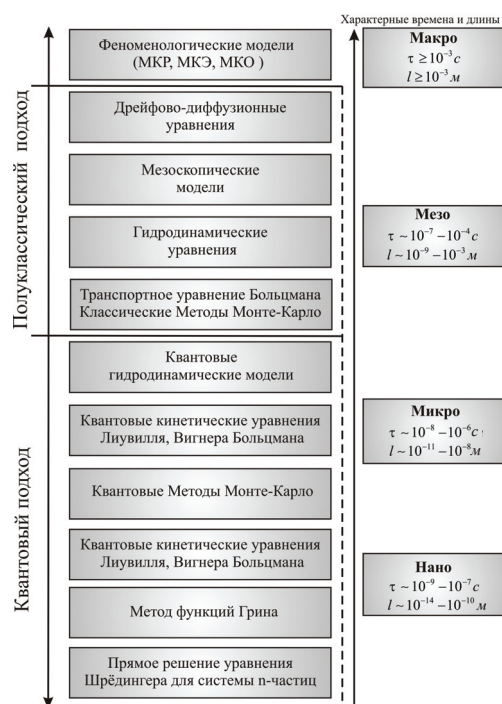


Рис. 2. Иерархия методов моделирования.

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

2. Структурно-функциональное моделирование

Традиционно методы компьютерного моделирования разделяют на две большие группы, представленные 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. 3.

Вторая группа – методы имитационного моделирования для систем многих тел будет рассмотрена ниже.

В большинстве случаев термоэлектрические модели сводятся к дифференциальным уравнениям (интегро-дифференциальным). Также задача может быть сформулирована в вариационной постановке поиска оптимума функционала, которая в свою очередь может быть сведена к системе дифференциальных уравнений (если это возможно). С помощью аналитических методов можно решить узкий класс задач, которые преимущественно являются искусственными и трудоёмкими.



Рис. 3. Классификация методов структурно-функционального моделирования.

Численные методы обладают свойством универсальности, что позволяет решать задачи, для которых аналитическое решение невозможно или слишком трудоёмко. 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. 3 представлены только самые известные: метод Рунге и метод Галеркина. Метод конечных объёмов 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 заключается 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. При учёте граничных условий получается 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 вращений, Якоби, Зейделя, прогонки и т.п. [34]). Вопросы устойчивости таких схем обсуждаются в работе [35].

При рассмотрении 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 однодолинного полупроводника [39]. На основе МКР проводились исследования термоэлектрического генератора рулонного типа [40], модели микронзонда измерения потенциала в неизотермическом полупроводнике [41] и моделей термоэлектрического холодильника [42, 43]. Разработана программа решения феноменологических уравнений, которые описывают эффекты Зеебека, Холла, Нернста, Пельтье, Эттингсгаузена и Ригги-Ледюка для объектов разной геометрической формы [44]. МКР применялись при исследовании сегментных термоэлементов [45-46].

Методы конечных разностей используются практически во всех теоретических исследованиях, как в качестве вспомогательного, так и основного инструмента.

4. Методы конечных элементов (МКЭ)

4.1. Суть метода

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 различной сложности МКЭ-анализ даёт универсальный и хорошо разработанный подход для решения прикладных задач термоэлектрического приборостроения.

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

- дискретизация области решения;
- выбор интерполяции решения на конечном элементе;
- формирование базисных функций;
- подсчёт невязки дифференциальной задачи с использованием приближенного решения в виде рядов;
- формирование матриц жёсткости для элементов. Ортогонализация невязки;
- ансамблирование матриц жёсткости по элементам;
- учёт граничных условий;
- решение системы алгебраических уравнений [47, 48].

На рис. 4 представлена общая схема моделирования термоэлектрических приборов с помощью алгоритмов МКЭ.

Вопросы генерирования конечно-элементной сетки обсуждаются в работе [49]. Обзор методов триангуляции Делоне дан в [50]. Рассмотрению алгоритма Рапперта, разработанного специально для МКЭ, посвящена работа [51]. Возможности построения конечно-элементной сетки для любой геометрической области, если в качестве элементов выбраны 2D-треугольники/3D-тетраэдры, обсуждаются в работе [52]. Технологическим аспектам применения векторных конечных элементов при решении уравнений Максвелла посвящена работа [53].

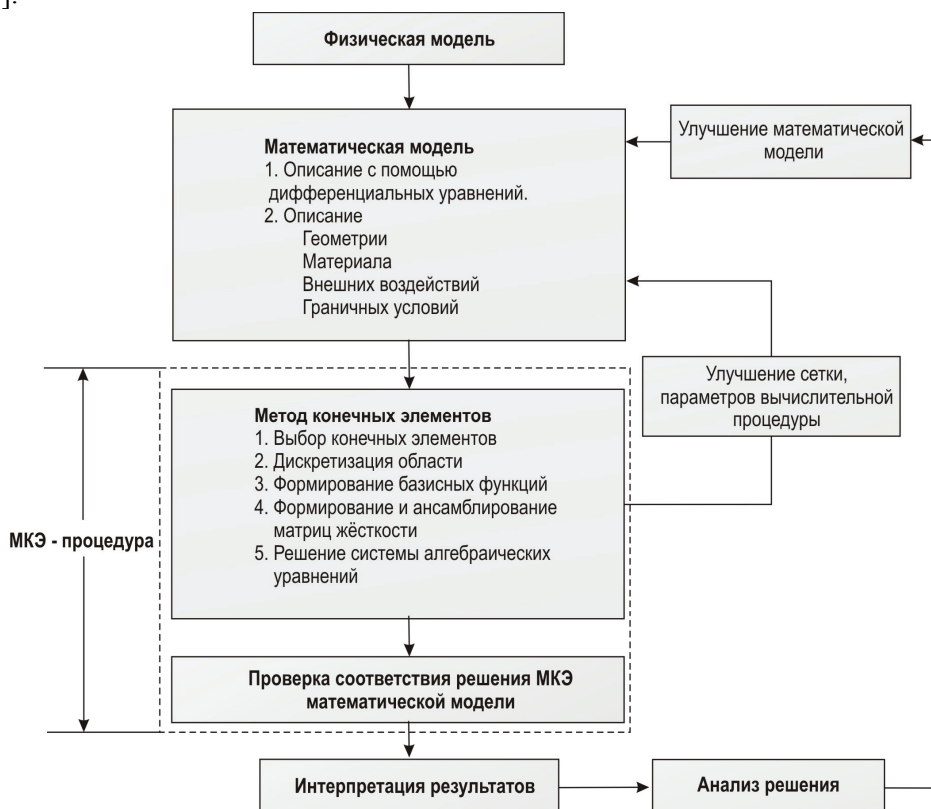


Рис. 4. Общая схема решения задачи методами конечных элементов.

Методы конечных элементов зарекомендовали себя в качестве универсального инструмента исследования физических объектов и являются наиболее разработанными и универсальными методами для исследования физических полей.

4.2. Использование МКЭ для исследования термоэлектрических моделей

Методы конечных элементов широко используются для исследования

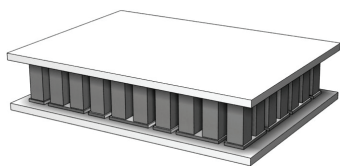


Рис. 5. Модель охладителя.

термоэлектрических моделей. Если в работе [54] МКЭ рассматривается с одномерными элементами без учета контактного сопротивления с небольшим количеством итераций из-за небольшой мощности компьютерной техники того времени, то в [55] рассматривается трехмерное стационарное и нестационарное моделирование однокаскадного и многокаскадного холодильника 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, что

МКЭ дает большую точность и лучшую оптимизацию. Можно утверждать, что МКЭ – самый 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, создание геометрии модели стало значительно легче, а также появился ряд новых усовершенствований. В частности, в работе [56] для моделирования термоэлектрических ледогенераторов бытовых холодильников применялся модуль ANSYS FLUENT, предназначенный для решения задач вычислительной гидрогазодинамики. Высокая производительность и точность этого модуля позволили учитывать эффекты, которые до этого не принимались во внимание, и проводить моделирование прибора в целом. Экспериментальные данные хорошо согласуются с моделью. Примеры использования новой версии пакета ANSYS можно найти на сайте [57], в том числе и для моделирования термоэлектрического модуля.

МКЭ нашел свое применение во многих областях, таких как механика деформируемого твёрдого 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 позволяет моделировать сопряженные поля и что ANSYS уже заполнило пробел, которым было термоэлектрическое моделирование. На рис. 5 представлена модель охладителя. Моделирование термоэлектрических устройств нуждается в учете не только электромагнитных и температурных полей, а и вызванных ими эффектов термоупругости и пьезоэффекты. Работа [55] посвящена моделированию термоэлектрического поля в устройстве SP-100 и минимизации всех видов деформации с помощью МКЭ и программного комплекса ANSYS.

В работе [59] приведен обзор функционально-градиентных материалов (ФГМ) – еще одного перспективного направления повышения термоэлектрической эффективности. Автор делает ударение 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 различных термоэлектрических приборов [60]. Автор указывает на высокую точность МКЭ и согласованность теоретических расчетов с экспериментом. Таким образом, для решения задач термоэлектричества при феноменологической постановке задачи необходимо использовать конечно-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 матричного вида термоэлемент, каждая из ветвей которого отделена от других стеклом, и в конце концов делается непонятный вывод, о том, что коэффициент теплопроводности такой конструкции меньше, но исходная мощность не увеличивается.

Еще одним применением трехмерного МКЭ и ANSYS является работа [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 охладительной поверхности в первом случае меньше, и результаты моделирования совпадают с одномерным моделированием. Таким образом, уменьшение площади контакта даже равномерного распределения напряжения не дает выигрыша в температуре охлаждения. Только равномерное распределение тока по площади контакта дает

увеличение температуры охлаждения на 21%. Авторы отмечают, что техническая реализация такого условия нуждается в использовании матричной структуры точечных контактов, чем можно достичь произвольного распределения потенциала в каждой ячейке и обеспечить максимальное охлаждение некоторых участков.

На рис. 6 представлена конечно-элементная сетка модели контакта. Данная работа еще раз подтверждает необходимость использования именно трехмерного моделирования для адекватного, наиболее полного описания и учета термоэлектрических эффектов.

Широкое использование ANSYS привело к отходу в тень другого конечно-элементного программного обеспечения. Comsol Multiphysics (CM) в отличие от ANSYS позволяет моделировать и исследовать без детального знания особенностей МКЭ. Интуитивно-понятный интерфейс позволяет исследователю сосредоточить свое внимание именно на физической задаче, не задумываясь над алгоритмически-программистскими проблемами. Относительная нераспространенность CM привела к отсутствию статей, пособий и описаний данного программного пакета за исключением Института термоэлектричества, в котором уже несколько лет проводится 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 приводится 4 примера использования МКЭ для различных термоэлектрических приборов – холодильника и генератора. Для моделирования температурного и электрического полей используется PDE форма (partial differential equation) уравнений термоэлектричества. В статье описаны возможности МКЭ для моделирования термоэлектрических объектов, а также создания моделей как стационарных, так и нестационарных с различными геометриями и полями разной природы. Примерами использования объектно-ориентированного программирования и МКЭ для создания моделей термоэлектрических генераторов и теплообменников являются работы [65, 66].

Применению МКЭ в микроэлектронике, исследованию термоэлектрических эффектов в МЭМС посвящены работы [67-70], разработан специализированный модуль more4ANSYS на основе алгоритмов [71]. МКЭ также применялся для моделирования технологических процессов, в частности для технологии спекания порошка [72].

Хотя моделирование и использование компьютерных технологий на основе МКЭ в настоящее время в термоэлектричестве широко используется, оно носит несистематический характер или является вспомогательным, а не основным методом исследования. Кроме того, в настоящее время 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, технологий. МКЭ – один из основных и хорошо себя зарекомендовавших методов компьютерного моделирования, является одним из самых перспективных для термоэлектрического приборостроения.

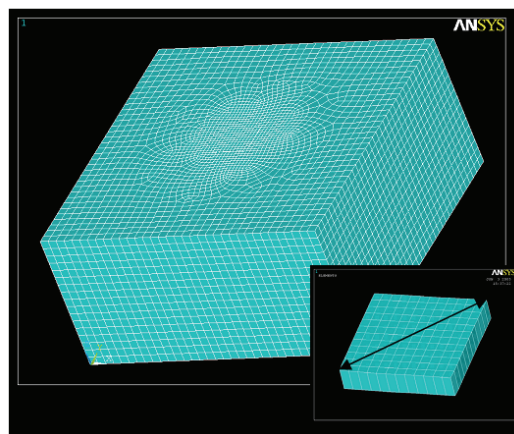


Рис. 6. Конечно-элементная сетка для контакта.

5. Конечно-объёмные методы

Метод конечных объемов получил широкое использование в гидродинамике. В термоэлектричестве для ячеек с произвольным количеством граней (ребер) формулируются алгебраические соотношения, иногда существенно нелинейные и больше похожие на гидравлические формулы. В отличие от МКЭ и метода конечных разностей в них отсутствуют узловые определяющие параметры среды, а предпочтение отдается параметрам на ребрах и гранях.

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

1. Определение управляющих уравнений:

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

$$\nabla \bar{J} = 0,$$

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

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

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

с граничными условиями

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

Для нахождения стационарного решения предлагается рассматривать нестационарную систему дифференциальных уравнений

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

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

Можно сделать вывод, что конечно-объёмные методы являются перспективными, но ещё не адаптированными к термоэлектричеству средствами моделирования. Необходимы разработки специализированных алгоритмов и программного обеспечения для решения задач термоэлектричества.

6. Имитационное моделирование

Имитационное моделирование – это исследование математической модели в виде алгоритмов, воспроизводящих функционирование системы путём последовательного выполнения большого количества элементарных операций. Классификация методов имитационного моделирования для систем многих тел приведена на рис. 7. Второй путь улучшения свойств термоэлектрических приборов – это улучшение 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. 7. Такой интегральный подход даёт возможность проектировать новые материалы с заданными свойствами.



Рис. 7. Классификация методов имитационного моделирования.

Традиционно методы моделирования делят 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.

6.1. Методы Монте-Карло. Общие свойства и классификация

Однозначного определения методов Монте-Карло нет, но можно сказать, 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) при помощи получения и преобразования случайных чисел.

Первая работа, в которой систематически излагался метод Монте-Карло, опубликована в 1949 году Метрополисом и Уламом [75], где 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 работа Владимирова и Соболя [76]. Монография [77] является первой систематической работой, посвященной рассмотрению статистической теории неидеальных систем, основанной на изучении систем многих частиц.

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

Классические методы Монте-Карло для системы частиц основаны на стохастическом переборе точек фазового пространства с предпочтительной 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, $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ – задаёт одно состояние системы, $\mathbf{r}_i, i = \overline{1, N}$ – задаёт 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 цепь состояний в фазовом пространстве, вдоль которой вычисляется интеграл (8). При стремлении количества элементов в цепи к бесконечности, можно получить точное значение среднего. При конечном числе элементов цепи можно получить значение интеграла (8) более точно, чем обычными методами интегрирования.

Квантовые методы Монте-Карло применяются для моделирования квантовой системы многих тел, к примеру для решения уравнения Больцмана для системы фононов [79]. В основном группа этих методов применяется для интегрирования многомерных интегралов, возникающих при решении уравнения Шрёдингера

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

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

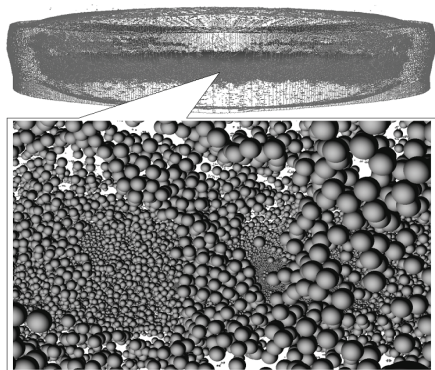


Рис. 8. Трёхмерная модель откольного разрушения тела. Содержит 100 миллионов частиц.

6.2. 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 нанокompозитов. Рассмотрены как двумерные, так и трехмерные модели для изучения переноса фононов. Трёхмерное моделирование дало высокие показатели эффективной теплопроводности. Авторы отмечают, что размещенные случайным образом наночастицы дают теплопроводность очень близкую к тому случаю, когда частицы размещены периодически. Трёхмерное моделирование обнаруживает новые эффекты и определяет другие термоэлектрические свойства. Метод Монте-Карло применяется также для вычисления нелинейного коэффициента Пельтье [85] для *InGaAs*. Численные 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: аппроксимация времени релаксации для кинетического уравнения Больцмана и решение 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 небольшое. Даже с увеличением времени релаксации добротность материала также 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 проведено исследование 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 даёт важную информацию о механизмах контроля движения электронов, включая слабое электрон-электронное взаимодействие и тепловое рассеивание. Показано, что при высоких температурах позиция энергии Ферми относительно молекулярных состояний может быть выведена 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, что открывает возможности для создания и прогнозирования свойств новых термоэлектрических материалов.

7. Моделирование методом частиц

Моделирование методом частиц – относительно новый и мало разработанный по сравнению с МКЭ метод – в термоэлектричестве практически не использовался. Метод частиц моделирует именно имитированием составляющих физического объекта. Описание моделей частиц в ячейке для термоэлектрических эффектов приведено в работе [97] для самых простых геометрий (две проволоки). В качестве термоэлектрических материалов выбраны металлы. Термоэлектрические явления рассматриваются как ансамбль частиц, а именно электронного газа. В состоянии равновесия распределение удовлетворяет закон Ферми-Дирака. Рассматриваются эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона. Вычислительная модель, а также разработанная программа отсутствуют. В нескольких работах на основе формализма Кубо была исследована одномерная модель Хаббарда [98, 99]. Рассчитаны основные кинетические коэффициенты — электропроводность, теплопроводность и коэффициент термоЭДС.

Хотя моделирование методом частиц используется в основном для исследования физико-химических свойств сплошных сред, он находит своё применение и для решения механических задач сильного неупругого деформирования и разрушения [100]. В работе сделан обзор по моделированию методом частиц скоростного разрушения твёрдых тел. Рассмотрены конкретные задачи: пробитие преград деформирующимся ударником, разрушение шара под действием сферической волны растяжения, откольное разрушение при плоском ударном взаимодействии пластин (рис. 8), сформулированы основные положения данного метода. При моделировании методом частиц не обязательно рассматривать физические частицы (электроны, ионы, молекулы), а можно и виртуальные макрочастицы, взаимодействие которых описывается некоторыми потенциалами [101]. Каждая частица имеет свои специфические свойства. Использование метода частиц не требует описания сложной теории, много эффектов появляется автоматически. В этом значительное преимущество именно имитационного моделирования. Но метод частиц требует большой мощности компьютеров, поскольку для адекватного моделирования необходимо их большое количество (порядка 10^8). Для реализации такой имитационной программы необходимы уже многопроцессорные мейнфреймы.

Исследование деформаций является перспективным направлением для исследования надёжности термоэлектрических приборов.

Предметом обзора [102] является наномасштабный теплоперенос. Экспериментально изучена теплопроводность многих поверхностей раздела твёрдых тел, но диапазон наблюдаемых свойств намного меньше предсказанного теорией. Стремительное развитие микроэлектроники в соответствии с законом Мура привело к необходимости исследования свойств наноматериалов. Микроэлектронные устройства слишком велики для прямого моделирования на атомном уровне, поэтому основным методом моделирования является кинетическое уравнение Больцмана [103]

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

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

Моделирование методом частиц является ещё одним перспективным методом компьютерного моделирования, который открывает возможности для выявления новых термоэлектрических эффектов и создания материалов с заданными свойствами.

Выводы

1. Компьютерные технологии и проведение вычислительных экспериментов является основным инструментом теоретического исследования термоэлектрических моделей.
2. Показано, что методы конечных элементов являются самыми разработанными и универсальными методами 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 объёмов является перспективным методом моделирования физических полей, но в данное время не применяется в термоэлектричестве. Необходима разработка алгоритмов МКО и программного обеспечения, реализующих данный метод.
5. Моделирование методом частиц и другие статистические методы моделирования являются перспективными 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 при использовании метода частиц приводят к необходимости использования алгоритмов параллельных вычислений.

Автор выражает признательность Лусте О.Я. за поддержку, постоянный интерес к данной работе и полезные консультации.

Литература

1. Anatyshuk L.I. The law of thermoelectric induction and its application for extending the capabilities of thermoelectricity // Proceedings ICT'03. 22nd International Conference on Thermoelectrics. 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. – Дис... канд. фіз.-мат. наук: 01.04.01. – Чернівці, 2007. – 122 с.
 4. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М.: Физматлит, 2001. – 320 с.
 5. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц / Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
 6. Ортега Дж., Пул. У. Введение в численные методы дифференциальных уравнений / Пер. с англ.: Под ред. А.А. Абрамова. – М.: Наука, 1986. – 288 с.
 7. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
 8. Сабоннадьер Ж.К., Кулон Ж.-Л. Метод конечных элементов и САПР / Пер. с франц. – М.: Мир, 1989. – 190 с.
 9. Шайдуров В.В. Многосеточные методы конечных элементов. – М.: Наука. – 1989. – 288 с.
 10. Митчелл П., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными / Пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 216 с.
 11. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация / Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 318 с.
 12. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для решения эллиптических уравнений. – Новосибирск: ИМ СОРАН, 2000. – 345 с.
 13. Щерба А.А., Резинкина М.М. Моделирование и анализ электрических полей энергетических объектов. – К.: Наук. книга, 2008. – 248 с.
 14. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975. – 392 с.
 15. Frenkel D., Smith B. Understanding Molecular Simulation. From algorithms to Applications. – Academic Press. – 2002. – 638 p.
 16. Анатычук Л. И. Термоэлектричество. Термоэлектрические преобразователи энергии. – 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. – М.: Издательство Бином, СПб.: Невский диалект, 1999 г. – 560 с.
 21. Anantram M.P., Lundstrom M.S., Nikonov D.E. Modeling of nanoscale devices // Proceedings of the IEEE. – 2008. – Vol. 96, № 9. – P. 1511 - 1550.
 22. Paulsson M. Non Equilibrium Green's Functions for Dummies: Introduction to the One Particle NEGF equations // School of Electrical & Computer Eng, Purdue Univ, W. Lafayette IN, – 2004. – P. 1-9.
 23. Datta S. Nanoscale Device Modeling: The Green's Function Method // Superlattices & Microstructures. – 2000. – Vol. 28, № 4. – P. 253-278.
 24. Sutmann G. Classical Molecular Dynamics // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. — P. 211-254.
 25. Lubich Ch. Integrators for Quantum Dynamics: A numerical Analyst's Brief Review // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. – P. 459-466.

26. Manthe U. Quantum Molecular Dynamics with Wave Packets // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. — P. 361-375.
27. Kratzer P. Monte Carlo and kinetic Monte Carlo methods – a tutorial // Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences - Lecture Notes, NIC Series, Jülich, Forschungszentrum Jülich – 2009. — P. 51 – 76.
28. Lewerenz M. Monte Carlo Methods: Overview and Basics // <http://www.fz-juelich.de/nic-series/> Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes. — Jülich: John von Neumann Institute for Computing. — 2002. — P. 1-24.
29. Foulkes W.M.C. Quantum Monte Carlo simulations of solids // Rev. Mod. Phys. – 2001. – Vol. 73, № 1. – P. 33-83.
30. Galler M. Multigroup equations for the description of the particle transport in semiconductors. – Singapore: World Scientific Publishing, 2005. – 234 p.
31. Weib J.-P. Numerical analysis of Lattice Boltzmann methods for the heat equation on bounded interval. – Universitat Karlsruhe (TH), 2006. – 190 p.
32. Jünger A. Transport Equations for Semiconductors. – Heidelberg, Springer, 2009. – 315 p.
33. Лусте О.Я. Фізика вихрових термоелементів і вимірювальних приладів на їх основі: Дис. доктора фіз.-мат. наук. – Чернівці, 2003.
34. Вержбицкий В.М. Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения): Учеб. пособие для вузов – М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век», 2005. – 432 с.
35. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – 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. – 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, SC USA. – 2005. – P. 364- 369.*
47. Эстербю О., Златев З. Прямые методы для разреженных матриц. – М.: Мир., 1987. – 120 с.
48. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений / Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – 333 с.
49. Liu G.R. *Mesh Free Methods.* – CRC Press. – 2003. – 693 p.
50. Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне // *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., Шурина Э.П. Векторный метод конечных элементов. – Новосибирск. – 2001. – 69 с.
54. Lau P.G., Buist R.J. Calculation of thermoelectric power generation performance using finite element analysis // *Proceedings ICT'97. XVI International Conference on Thermoelectrics. Dresden, Germany. – 1997. – P. 563 – 566.*
55. Antonova E.E., Looman D.C. Finite Element for Thermoelectric Device in ANSYS // *Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 215 – 218.*
56. Rodríguez A. Development and experimental validation of a computational model in order to simulate ice cube production in a thermoelectric ice-maker: Thesis doctor. – Pamplona, 2009. –
57. Multi-domain simulation of Lithium Polymer Battery // *Ozen Engineering.* – 2009.
58. Soto M.A., Rama Venkatasubramanian. ANSYS-based detailed thermo-mechanical modeling of complex thermoelectric power designs // *Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 219 – 221.*
59. Rowe D.M. *Thermoelectric Handbook* // Kuznetsov V.I. *Functionally Graded Materials for Thermoelectric Applications.* – Taylor & Francis Group. – 2006.
60. Peterson S.W., Strauss A. Simulation of a thermoelectric element using B-spline collocation methods // *AIP Conf. Proc.* – 1998. – Vol. 420. – P.1652-1658.
61. Kuraishi M., Komine T., Teramoto T., Sugita R., Hasegawa Y. Numerical Analysis of Effective Thermal Conductivity in Microwire Array Element // *Proceedings ICT'06. 25th International Conference on Thermoelectrics. Vienna, Austria. – 2006. – P. 582-585.*
62. Zhang Y., Bian Z., Shakouri A. Improved maximum cooling by optimizing the geometry of thermoelectric leg elements // *Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 248 – 251.*
63. Прыбыла А.В. КПД спирального прямоугольного анизотропного термоэлемента с учётом температурной зависимости кинетических коэффициентов // *Термоэлектричество.* – 2008. – №1. – С. 34-39.
64. Кобылянский Р.Р. Компьютерное исследование поперечной термоЭДС в короткозамкнутых термоэлементах // *Термоэлектричество.* – 2007. – №2. – С. 21-27.
65. Jaegle M., Bartel M., Ebling D., Böttner A. Multiphysics simulation of thermoelectric systems // *Proceedings ECT-2008. 6th European Conference on Thermoelectrics. Paris, France. – 2008. – O. 27.*
66. Junior Ch., Richter Ch., Tegethoff W., Lemke N., Köhler J. Modeling and Simulation of a Thermoelectric Heat Exchanger using the Object-Oriented Library TIL // *Modelica Association.* – 2008. – P. 437-445.

67. Bechtold T., Rudnyi E.B., Korvink J. G. Dynamic Electro-Thermal Simulation of Microsystems // *Journal of Micromechanics and Microengineering*. – Vol. 15, № 15. – P. R13-R31(1).
68. Bechtold T. Model Order Reduction of Electro-Thermal MEMS. – Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Fakultät für ANgewandte Wissenschaften der Albert-Ludwigs Universität Freiburg im Bresgau – 2005. – 202 p.
69. Gad-el-Hak M. MEMS: Introduction and fundamentals // Kirby R., Karniadakis G., Mikulchenko O., Kartikeya M. Integrated Simulation for MEMS: coupling Flow-Structure-Thermal-Electrical Domains – Taylor & Francis Group. – 2006.
70. Huesgen T., Kockmann N., Woias P. Design and Fabrication of a MEMS Thermoelectric Generator for Energy Harvesting // *Sensors and Actuators A: Physical*. – 2008. – Vol. 145-146. – P. 423-429.
71. Баландин М.Ю., Шурина Э.П. Методы решения СЛАУ большой размерности. – 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., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. – М.: Наука, –1977.
78. Астрахарчик Г.Е. Исследование фазовой диаграммы и физических свойств многочастичных систем методом Монте-Карло. Дис. Канд. физ.-мат. наук. – Троицк. – 2005.
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. Humphrey T.E., Linke H. Inhomogeneously doped thermoelectric nanomaterials // Plenary presentation at the International Thermoelectrics Conference, Adelaide. – 2004. – 5 p.
83. Dubi Y. Ventra Di. Theory of non-equilibrium thermoelectric effects in nanoscale junctions // *Nano Letters*. – 2009. – Vol. 9, № 1. – P. 97-101.
84. Jeng M., Yang R., Chen G. Monte Carlo Simulation of Thermoelectric Properties of Nanocomposites // *Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics*. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 21-26.
85. 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.
86. 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.
87. Paulsson M., Datta S. Thermoelectric effect in molecular electronics. – 2003 // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67, №24. – P. 122-126.
88. Nakamura H., Hatano N., Shirasaki R. Quantum Nerst Effect. // *Foundations of quantum mechanics in the light of new technology ISQM*. – Tokyo. – P. 121-127.
89. 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.
90. Segal D. Thermoelectric Effect in Molecular junctions: a tool for revealing of transport mechanism // *Physical Review B*. – 2005. – Vol. 72, №16. – P. 23-31.
91. Rowe D.M. Thermoelectric Handbook // Bo Brummerstedt Iversen. Structural Studies of Thermoelectric Materials. – Taylor & Francis Group. – 2006.
92. Humphrey T.E., Linke H. Reversible thermoelectric nanomaterials // *Physical Review Letters*. – 2005. – Vol. 94, № 9. – P. 096601-096605.
93. Zebajadi M., Esfarjani K., Shakouri A. Nonlinear Peltier effect in semiconductors // *Applied Physics Letters*. – Vol. 91, № 12, d. 122104 (3 pages) (2007).
94. Farhangfar Sh. Quantum size effects in solitary wires of bismuth // *Physics Review*. – 2007. – Vol. 76, № 20. – P. 205437-205442.
95. Esfarjani K., Zebajadi M., Shakouri A., Kawazoe Y.. Thermoelectric properties of a nanocontact // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 73, № 8. – P. 212-216.
96. 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.
97. Maes C., Van Wieren Maarten H. Thermoelectric phenomena via an interacting particle system // *Journal of physics. A, mathematical and general*. – 2005. – Vol. 7, №5 – P. 1005-1020.
98. 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.
99. Zemljic M.M., Prelovsek P. Thermoelectric power in one-dimensional Hubbard model // *Physical Review*. – 2004. – Vol. 71, № 8. – P. 085110- 085116.
100. Кривцов А.М., Волковец И.Б., Ткачёв П.В., Цаплин В.А. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твёрдых тел // *Физика твердого тела*. – 2004. – Т. 46. – № 6. – С. 1025-1030.
101. Kaplan I.G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. — John Wiley & Sons Ltd. — 2006. — 375 p.
102. 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.
103. Hagelstein P.L., Kucherov Y. Models for the Thermal Diode Open-Circuit Voltage // *Proceedings ICT'05. 24th International Conference on Thermoelectrics*. Clemson, SC USA. – 2005. – P. 457-461.

Поступила в редакцию 10.02.09.