МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА
НАУКОВО-НАВЧАЛЬНИЙ ІНСТИТУТ
КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ

Кафедра комп'ютерної фізики

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до дипломної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Конкурентні вклади дзеркального та дифузного відбиття в формуванні теплових потоків у нанострічках»

Виконала: студентка 2 курсу, групи НФ-64
Медінцева Т.В.
спеціальність:
105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма: Комп'ютерна фізика
Керівник: д.ф.-м.н., професор Нємченко К.Е.

Рецензент:

Харків – 2022

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики
Кафедра комп'ютерної фізики
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр
Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Освітня програма: Комп'ютерна фізика

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО
підпис

"____" _____2020 року

З А В Д А Н Н Я

НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ

Медінцева Тетяна Володимирівна

1.Тема роботи «Конкурентні вклади дзеркального та дифузного відбиття в формуванні теплових потоків у нанострічках» керівник роботи: Нємченко Костянтин Едуардович, доктор фізико-математичних наук. Затверджено наказом по університету від 21 грудня 2021 року № 0210–05/2288.

2. Строк подання студентом роботи 12.05.2022

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

1) вивчити механізми теплопровідності фононних систем в нанострічках при низьких температурах;

2) дослідити фізичні механізми взаємодії фононів з границями зразків та їх вплив на теплопровідність тіл;

3) провести розрахунки потоку тепла в нанострічках в моделі чисто дифузного відбиття від границь;

4) запропонувати та розвинути модель одночасного дзеркального та дифузного відбиття фононів від границь;

5) дослідити конкурентні вклади дзеркального та дифузного відбиттся в теплопровідність двовимірних систем;

6) провести порівняння з даними вимірювань та запропонувати нові експерименти на основі ідей, що наведені у дипломній роботі.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Вибір теми.
2	Затвердження теми на кафедрі
3	Робота над літературою та іншими джерелами
4	Написання вступу до роботи та першого розділу
5	Написання другого розділу
6	Написання третього розділу
7	Завершення написання дипломної роботи (висновки та література)
8	Подача науковому керівнику
9	Відгук, рецензія, підготовка до захисту
10	Попередній захист
11	Захист

5.Дата видачі завдання

Студент _____ Тетяна МЕДІНЦЕВА

підпис

Керівник роботи _____ Костянтин НЄМЧЕНКО

підпис

РЕФЕРАТ

Тетяна Медінцева «Конкурентні вклади дзеркального та дифузного відбиття в формуванні теплових потоків у нанострічках»
Кваліфікаційна робота магістра з прикладної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н.Каразіна, 2022. – 62 с.

У цій роботі досліджуються фізичні механізми розсіювання фононів на границях зразка в двовимірному випадку та їх вплив на теплопровідність зразка. Запропоновано аналітичну модель теплопровідності двовимірного фононного газу в двовимірних зразках кінцевих розмірів. Основною метою роботи є розгляд фізичних механізмів, що забезпечують перехід від дзеркальних граничних умов до повністю дифузійних. Зокрема, запропоновано модель для ефективного урахування шорсткості для граничних випадків слабкого та абсолютного дифузного розсіювання та проведено порівняння з існуючими моделями. У дипломі досліджується стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами зразків. В результаті розв’язання задачі було отримано систему інтегральних рівнянь для функцій розподілу фононів, що падають та випромінюються боковими границями. Цю систему можна розв’язати як ітераційним методом, так і наближено аналітично. Отримані рішення описують баланс теплових потоків, розподіл температури у зразку та залежність ефективного коефіцієнта теплопровідності від розміру зразка. Запропоновані методи урахування послідовних фононних взаємодії з границями з довільними рівнями шорсткості дозволяють визначити умови застосовності для існуючих моделей теплопровідності двовимірних зразків кінцевих розмірів.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ДВОВИМІРНИЙ ГАЗ ФОНОНІВ, НАНОСТРІЧКИ, ЗЕРКАЛЬНЕ ВІДБИТТЯ, ДІФУЗНЕ ВІДБИТТЯ.

РЕФЕРАТ

Татьяна Мединцева «Конкурентные вклады зеркального и диффузного отражения в формировании тепловых потоков в нанолентах»
Квалификационная работа магистра прикладной физики. – Х.: Харьковский национальный университет имени В. Н.Каразина, 2022. – 62 с.

В дипмломе исследуются физические механизмы рассеяния фононов на границах образца в двумерном случае и их влияние на теплопроводность образца. Предложена аналитическая модель теплопроводности двумерного фононного газа в двухмерных образцах конечных размеров. Основной целью работы является рассмотрение физических механизмов, обеспечивающих переход от зеркальных предельных условий к полностью диффузным. В частности, предложена модель для эффективного учета шероховатости для предельных случаев слабого и абсолютного диффузного рассеяния и сравнения с существующими моделями. В дипломе исследуется стационарное неравновесное состояние фононной системы, которое обеспечивается только взаимодействием фононов с боковыми границами образцов. В результате решения задачи была получена система интегральных уравнений для функций распределения падающих и излучаемых боковыми границами фононов. Эту систему можно решить как итерационным методом, так и приближенно аналитически. Полученные решения описывают баланс тепловых потоков, распределение температуры образца и зависимость эффективного коэффициента теплопроводности от размера образца. Предлагаемые методы учета последовательных фононных взаимодействий с границами с произвольными уровнями шероховатости позволяют определить условия применимости для существующих моделей теплопроводности двумерных образцов конечных размеров.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ, ДВУМЕРНЫЙ ГАЗ ФОНОНОВ, НАНОЛЕНТЫ, ЗЕРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ, ДИФФУЗНОЕ ОТРАЖЕНИЕ

ABSTRACT

Tatiana Medintseva Competitive contributions of specular and diffuse reflection in the formation of heat fluxes in nanobands "

Qualification work of the master of applied physics. – Kharkiv. – V. N. Karazin Kharkiv National University, 2022. – 62 p.

In this diploma we investigate the physical mechanisms of phonon scattering at the sample boundaries in the two-dimensional case and their influence on the thermal conductivity of the sample. An analytical model of thermal conductivity of two-dimensional phonon gas in two-dimensional samples of finite dimensions is proposed. The main purpose of the work is to consider the physical mechanisms that ensure the transition from mirror boundary conditions to fully diffuse. In particular, a model for effective roughness accounting for the limit cases of weak and absolute diffuse scattering is proposed and a comparison is made with existing models. The diploma investigates the stationary nonequilibrium state of the phonon system, which is provided only by the interaction of phonons with the lateral boundaries of the samples. As a result of solving the problem, a system of integral equations was obtained for the functions of the distribution of phonons falling and emitted by lateral boundaries. This system can be solved both iteratively and approximately analytically. The obtained solutions describe the balance of heat fluxes, the temperature distribution in the sample and the dependence of the effective thermal conductivity on the sample size. The proposed methods of taking into account successive phonon interactions with boundaries with arbitrary levels of roughness allow us to determine the conditions of applicability for existing models of thermal conductivity of two-dimensional samples of finite size.

KEY WORDS: THERMAL CONDUCTIVITY, TWO-DIMENSIONAL GAS OF BACKGROUNDS, NANO RIBBONS, SPECULAR REFLECTION, DIFFUSIVE REFLECTION.

ЗМІСТ

ВСТУП 1
1. ПРОБЛЕМИ ТЕОРЕТИЧНОГО ОПИСУ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ У ДВОВИМІРНИХ СИСТЕМАХ 10
1.1. Нанострічки в сучасних технологіях 10
1.2. Перенос тепла у наноматериалах 14
1.3. Постановка задачі 17
2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ У НАНОСТРІЧКАХ ПРИ ДИФУЗНОМУ РЕЖИМІ ВЗАЄМОДІЇ ФОНОНІВ З ГРАНИЦЯМИ 19
2.1. Абсолютне дифузійне пружне відбиття 20
2.2. Абсолютно поглинаюча межа 20
2.3. Ітераційне рівняння для розподілу температури 25
2.4. Інтегральне рівняння для розподілу температури 28
2.5. Баланс теплового потоку 33
2.5. Обговорення коефіцієнта ефективної теплопровідності 35
2.7. Висновки до розділу 40
3. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ У НАНОСТРІЧКАХ ПРИ ПОВНІСТЮ ДЗЕРКАЛЬНОМУ ВІДБІТТІ ФОНОНІВ 40
3.1. Абсолютно дзеркальна межа 40
3.2. Кінцева кількість відбиттів 42
3.3. Приклад поглинання на межі 43
3.4. Висновки до розділу 46
4. ЗАГАЛЬНИЙ ВИПАДОК КОМБИНОВАНОГО МЕХАНИЗМУ ВЗАЄМОДІЇ 47
4.1. Аналітична модель. 47
4.2. Методика числового розв’язання проблеми 48
4.3. Випадок малої ймовірності абсолютно дзеркального відбиття 51
4.4. Рівноймовірні дзеркальне та дифузне відображення 55
4.5. Випадок великої ймовірності дзеркального відображення 57
ВИСНОВКИ 61
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ 62

ВСТУП

Актуальність теми. Однією з проблем, що виникають при дослідженні теплопровідності фононних систем з низькою розмірністю при низьких температурах, є поява розбіжності у виразах для коефіцієнта теплопровідності як функції від розміру зракзка, а також наявність незвичайних залежностей теплових потоків від градієнтів температури.

Наприклад, у загальноприйнятій моделі Казимира–Зімана передбачається, що на бічних поверхнях зразка зовнішніми джерелами створюється лінійний градієнт температури. Більше того, в моделі Казимира необхідні дві умови на межі, які відповідають так званій повній акомодації.

Перша умова передбачає дифузне відбиття, при якому фонон відбивається з ізотропною функцією кутового розподілу. Друга умова – це перерозподіл фононів залежно від енергії, щоб розподіл відбитих фононів відповідав випромінюванню ідеального чорного тіла – тобто відбиття фононів повинно бути непружним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою бокових стінок з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за наявності теплового контакту між бічними краями зразка та термальними ваннами, що мають задану розподіл температури. У випадку зразка з термоізольованими межами (наприклад, коли зразок знаходиться у вакуумі) або, принаймні, з недосконалим тепловим контактом, другу умову виконати практично неможливо.

У роботі досліджується стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами зразків. Взаємодія фононів між собою вважається незначною, а бічні межі зразка вважаються термоізольованими.

Основною метою дипломної роботи є аналітичне дослідження радіаційного теплообміну фононів у 2D-зразках та його залежності від взаємодії з крайовими межами у випадку абсолютно ізотропного дифузного розсіювання, та наявності дзеркального розсіяння. Така постановка задачі

узагальнює, зокрема, результати роботи на двовимірний випадок і дає змогу розв’язувати задачу не лише чисельними методами, а й отримати аналітичні результати.

Об’єкт дослідження – перенесення тепла в двовимірних наноматеріалах

Предмет дослідження – дифузійний та дзеркальниймеханізми взаємодії фононів з границями двовимірних зразків та їх вплив на теплопровідність нанострічок

Методи дослідження – математичні методи фізичної кінетики, які дають змогу дослідити різні типи взаємодії фононів з границями двовимірних зразків наноматеріалів.

Наукова новизна одержаних результатів – досліджено механізми взаємодії фононів з границями двовимірних зразків та здобуто апроксимуючи аналітичні формули, які є справедливими в різних граничних випадках.

Практичне значення отриманих результатів:

– запропоновані аналітичні формули дозволять розраховувати значення коефіцієнтів нанорозмірних двовимірних структур.

– дослідження фізичних механізмів взаємодії фононів з границями зразків дозволить визначити їх вплив на теплопровідність тіл;

– проведені розрахунки потоку тепла в нанострічках дозволять запропонувати та розвинути модель одночасного дзеркального та дифузного відбиття фононів від границь;

– проведені порівняння з даними вимірювань дозволять пояснити існуючі експерименти та запропонувати нові експерименти на основі ідей, що наведені у дипломній роботі.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 62 сторінок, із них основного тексту 51 сторінка, 22 рисунки за текстом, список використаних джерел із 16 найменувань на 1 сторінці.

1. ПРОБЛЕМИ ТЕОРЕТИЧНОГО ОПИСУ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ У ДВОВИМІРНИХ СИСТЕМАХ

1.1. Нанострічки в сучасних технологіях

Нанотехнології – це багатопрофільна область досліджень і розробок, заснована на знаннях і володінні нескінченно малим. Точніше, вони об'єднують усі методи, які дозволяють виготовляти, маніпулювати та характеризувати матерію в нанометричному масштабі.

Нанотехнології — це формалізація понять і процесів, отриманих від нанонаук, тобто наук, які спрямовані на вивчення та розуміння властивостей матерії в атомному та молекулярному масштабі.

Наноматеріал – це матеріал (у вигляді порошку, аерозолю або квазігазу, рідкої суспензії, гелю), що володіє специфічними властивостями за своїми розмірами та нанометричною структурою. Наноматеріали — у загальному розумінні цього терміна — зазвичай є результатом нанотехнологій, на відміну від наночастинок, які можуть мати природне походження або бути результатом таких процесів, як зварювання, копчення, полірування. 18 жовтня 2011 року Європейська комісія опублікувала свої рекомендації щодо визначення наноматеріалів: «під наноматеріалом розуміється природний матеріал, випадково утворений або виготовлений, що містить вільні частинки, у вигляді агрегату або у вигляді агломерату. , з яких щонайменше 50% частинок у числовому розподілі за розмірами мають один або кілька зовнішніх розмірів від 1 до 100 нм».

Багато матеріалів є предметом досліджень, спрямованих на отримання їх у вигляді наночастинок (металів, кераміки, діелектричних матеріалів, магнітних оксидів, різних полімерів, вуглецю та ін.), окремо або в складених формах чи структурах.

Існує два основних сімейства наноматеріалів:

1. Нанооб'єкти, які є матеріалами, один, два або три зовнішні виміри мають нанометричний масштаб, тобто приблизно від 1 до 100 нм. Серед нанооб'єктів можна виділити три категорії:
   - наночастинки, які позначають нанооб'єкти, три зовнішні виміри яких знаходяться в нанометричному масштабі: наночастинки латексу, оксиду цинку, заліза і церію, оксиду алюмінію, діоксиду титану, карбонату кальцію тощо;
   - нановолокна, нанотрубки, нановолокна або наностржні, які стосуються нанооб’єктів, два зовнішні виміри яких знаходяться в нанометричному масштабі, а третій вимір значно вищий (вуглецеві нанотрубки, поліефірні нановолокна, борні нанотрубки тощо). Ці терміни позначають видовжені нанооб'єкти з перерізом від 1 до кількох десятків нм і довжиною від 500 до 10 000 нм;
   - нанолистів, наноплощин або нанопластин, які визначають нанооб'єкти, один зовнішній вимір яких у нанометричному масштабі, а два інших виміри значно більші (нанопластинки глини, нанопластини селеніду кадмію тощо) .

Нанооб'єкти можна використовувати як такі у вигляді порошку, рідкої суспензії або гелю.

2. Наноструктуровані матеріали, які мають внутрішню або поверхневу структуру на нанорозмірі. Серед наноструктурованих матеріалів можна виділити кілька сімейств, серед яких:
   - агрегати та агломерати нано-об'єктів. Нанооб’єкти можуть бути як в індивідуальній формі (тобто у вигляді первинних частинок), так і у вигляді агрегатів або агломератів, розмір яких значно перевищує 100 нм.
   - нанокомпозитів. Ці матеріали складаються для всіх або частини нано-об'єктів, що надає їм покращені або специфічні властивості нанометричного розміру. Нанооб’єкти вбудовуються в матрицю або на поверхню, щоб забезпечити нову функціональність або змінити певні

механічні, магнітні, теплові властивості тощо. Прикладом нанокомпозитів є полімери, наповнені вуглецевими нанотрубками, які використовуються в секторі спортивного обладнання для підвищення їх механічної стійкості та зменшення ваги.

- нанопористі матеріали. Ці матеріали мають пори нанометричного розміру. Аерогелі кремнезему є нанопористими матеріалами, які демонструють чудові теплоізоляційні властивості.

Наноматеріали, які навмисно виробляються людьми для конкретних застосувань і володіють специфічними властивостями, називаються «наноматеріалами, що виготовляються».

Серед цих виготовлених наноматеріалів деякі вже вироблялися протягом багатьох років у великих тоннах, наприклад, діоксид титану, сажа, глинозем, карбонат кальцію або аморфний кремнезем. Інші новітні вироби виробляються в менших кількостях, наприклад, вуглецеві нанотрубки, квантові точки або дендримери.

Існують також наноматеріали, що виробляються людиною ненавмисно, іноді називаються наддрібними частинками, що утворюються в результаті певних термічних і механічних процесів, таких як зварювальні пари або термічне розпилення, викиди двигунів внутрішнього згоряння тощо.

Нарешті, в нашому середовищі присутні природні наддрібні частинки, такі як вулканічні пари або віруси.

Перехід матерії до нанометричних розмірів виявляє несподівані властивості, які часто повністю відрізняються від властивостей тих же матеріалів у мікро- або макроскопічному масштабі, зокрема з точки зору механічної стійкості, хімічної реакційної здатності, електропровідності та флуоресценції. Таким чином, нанотехнології ведуть до розробки матеріалів, чиї фундаментальні властивості (хімічні, механічні, оптичні, біологічні тощо) можуть бути змінені. Наприклад, золото абсолютно неактивне в мікрометричному масштабі, тоді як воно стає чудовим каталізатором хімічних реакцій, коли воно набуває нанометричних розмірів.

Йдеться про всі основні сімейства матеріалів: метали, кераміку, діелектрики, магнітні оксиди, полімери, вуглець тощо.

Завдяки своїм різноманітним і часто новим властивостям, наноматеріали мають дуже різноманітний потенціал, і їх використання відкриває багато перспектив.

Протягом останніх тридцяти років низькорозмірні структури, такі як колодязі, дроти та точки, були в центрі уваги матеріалознавства. У цьому класі матеріалів утримання електронів, дірок і збуджень у певних напрямках призводить до різких змін електронних, коливальних, оптичних, теплових і хімічних властивостей. Унікальні властивості низькорозмірних кристалів випливають із квантових ефектів, які виникають, коли хоча б один із трьох вимірів кристала зменшується до досить малого розміру, як правило, в діапазоні від 1 до 100 нм.

У той час як двовимірні (2D) тонкі кристали обмежують фізичні явища в площині, в одновимірній (1D) квантовій структурі (нанодроти, нанотрубки та нанострічки (NRs)) носії заряду та збудження мають лише один ступінь свободи. Ці кристалічні структури були в центрі уваги завдяки їхнім унікальним властивостям, таким як дуже висока електронна щільність станів, підвищена енергія зв’язку екситонів, залежна від діаметра заборонена зона, підвищене поверхневе розсіювання електронів і фононів і залежна від кіральності електронна зонна структура.

Нанострічки (НС), виготовлені з пластинчастих кристалів товщиною в один або кілька атомів, є новими формами одновимірних нанорозмірних матеріалів і є ідеальними системами для дослідження залежності основних властивостей від розміру та розмірності. Після успішного синтезу багатьох 2D-моношарових матеріалів їх одновимірна форма NR стала помітною через їх необхідність у нанорозмірних застосуваннях.

Таким чином, наноматеріали дають змогу впроваджувати проривні інновації в багатьох сферах діяльності, таких як охорона здоров’я, автомобільна промисловість, будівництво, агропродовольча та електроніка.

Нанострічки (НС) атомарних розмірів останніми роками займають перше місце в матеріалознавстві та наноелектроніці.

Інтерес до науки і техніки наноматеріалів виріс в останнє десятиліття в основному через їх надзвичайні фізичні та хімічні властивості порівняно з відповідними властивостями, наявними в сипучих матеріалах. Наноструктура характеризується своїм розміром, як це вказує на термін, що має вирішальні розміри порядку 1^100 нм. Існує ряд груп, у які наноструктури часто класифікуються. У цій главі наше обговорення наноструктур буде в першу чергу розділене на дві групи: (a) наноматеріали, що складаються з таких структур, як нанотрубки, нанодроти або наностержні, і наночастинки, і (b) нанокомпозити, які включають композитний матеріал, що включає будь-яку з вищезгаданих наноструктур у матриці, зокрема, тонкі ¢lms композитів полімер/нанотрубка.

Надзвичайно малий «розмір» у багатьох випадках надає наноструктурам їх унікальні фізичні та хімічні властивості. Кіттель перелічує кілька причин цих незвичайних властивостей: 1 (a) значна частина атомів в наноматеріалі складається з поверхневих атомів, на відміну від великої частини внутрішніх атомів, присутніх у об'ємних матеріалах; (b) відношення поверхневої енергії до повної енергії може бути порядку одиниці; (c) довжина хвилі електронів у зоні провідності або валентної зони обмежена геометричним розміром і коротша за довжину хвилі в об'ємному твердому тілі; (d) зсув довжини хвилі або граничних умов буде впливати на явища оптичного поглинання; і (e) чітко визначені межі в магнітних моношарах, таких як чергування ¢lms феромагнітного заліза та парамагнітного хрому, дають можливість для більшого контролю над магнітними властивостями шляхом тунелювання намагніченості через хромовий бар'єр.

1.2. Перенос тепла у наноматериалах

Нанорозмірне управління температурою створює все більш важливу проблему з постійним масштабуванням до менших компонентів в

наноелектроніці, розробкою термоелектричних пристроїв і нанорозширеної фотовольтаїки, а також дослідженням опосередкованої наночастками теплової терапії в медицині. Проте базове розуміння теплового транспорту від нанорозмірних джерел тепла все ще обмежене. Повний фундаментальний опис потоку енергії в матеріалах все ще невловимий, а поточній теорії перешкоджає відсутність експериментального підтвердження. Нещодавні роботи показали, що швидкість розсіювання тепла від джерела тепла значно зменшується нижче, ніж передбачено законом Фур'є для дифузійного теплопереносу, коли характерний розмір джерела менший, ніж середня вільний пробіг (MFP) домінуючих теплоносіїв (фононів). в діелектричних/напівпровідникових матеріалах)14-17,27. Це пов’язано з порушенням фундаментального припущення про дифузію тепла: існує достатньо зіткнень між теплоносіями для встановлення локальної теплової рівноваги та безперервного градієнта температури, вздовж якого розсіюється енергія. На масштабах довжини, малих порівняно з фононним МФП, ці зіткнення більше не відбуваються, і концепція безперервного градієнта температури більше не застосовується. Крім того, градієнт, апроксимований великою різницею температур на невеликій відстані, чітко дає змогу передбачити нефізично швидку дифузію тепла. Таким чином, справжня норма розсіювання тепла при переході теплового транспорту в балістичний режим буде значно нижчим, ніж дифузійний прогноз. Ще більше ускладнює те, що фонони-теплоносії в матеріалах мають широке поширення МФП, від кількох нанометрів до сотень мікрон. Для заданого розміру джерела тепла фонони з МФП, меншими за розмір гарячої точки, залишаються повністю дифузійними і сприяють ефективному розсіювання тепла та високій теплопровідності (або, що еквівалентно, низькому тепловому опору). Навпаки, фонони з довгими МФП подорожують далеко від джерела тепла перед розсіюванням, з ефективним тепловим опором, набагато більшим, ніж дифузійне передбачення. Фонони з проміжними МФП знаходяться між ними: теплопередача є квазібалістичною з різним ступенем зменшеного внеску в теплопровідність від нанорозмірного джерела.

Однією з проблем, що виникають при дослідженні теплопровідності фононних систем з низькою розмірністю при низьких температурах, є поява розбіжності у виразах для коефіцієнта теплопровідності як функції від розміру вибірки [1 – 4], а також наявність незвичайних залежностей теплових потоків від градієнтів температури [2, 5].

Наприклад, у загальноприйнятій моделі Казимира–Займана [6, 7] передбачається, що на бічних поверхнях зразка зовнішніми джерелами створюється лінійний градієнт температури. Більше того, в моделі Казимира необхідні дві умови на межі, які відповідають так званій повній акомодації.

Перша умова передбачає дифузне відбиття, при якому фонон відбивається з ізотропною функцією кутового розподілу. Друга умова – це перерозподіл фононів залежно від енергії, щоб розподіл відбитих фононів відповідав випромінюванню ідеального чорного тіла – тобто відбиття фононів повинно бути непружним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою меж з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за наявності теплового контакту між бічними краями зразка та термальними ваннами, що мають задану розподіл температури. У випадку зразка з термоізольованими межами (наприклад, коли зразок знаходиться у вакуумі) або, принаймні, з недосконалим тепловим контактом, другу умову виконати практично неможливо.

Тут досліджується стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами зразків. Взаємодія фононів між собою вважається незначною, а бічні межі зразка вважаються термоізольованими.

Основною метою роботи є аналітичне дослідження радіаційного теплообміну фононів у 2D-зразках та його залежності від взаємодії з крайовими границями у випадку абсолютно ізотропного дифузного розсіювання, тобто за повної відсутності дзеркального розсіяння. Така постановка задачі узагальнює, зокрема, результати роботи [8, 9] на

двовимірний випадок і дає змогу розв'язувати задачу не лише чисельними методами [8 – 10], а й отримати аналітичні результати.

1.3. Постановка задачі

В якості об'єкта дослідження ми розглядаємо фононну систему прямокутної 2D смуги шириною W і довжиною L (рис. 1). Для простоти ми розглядаємо лише поздовжні фонони і не включаємо вигинні коливання або поперечні фонони. Для такої системи введемо 2D густини енергії

$$E = \int \hbar\omega \, n(T) d\Gamma \tag{1}$$

Тут $\omega = \omega(\mathbf{k})$ — відношення енергія-імпульс для фононів, $n(T)$ — функція розподілу фононів і

$$d\Gamma = \frac{d^2k}{(2\pi)^2} = \frac{dk_x dk_z}{(2\pi)^2} \tag{2}$$

це 2D фазовий об'єм. Відповідну щільність теплоємності (при постійній площі) можна визначити так

$$C_S = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_S = \int \hbar\omega \frac{\partial n(T)}{\partial T} d\Gamma, \tag{3}$$

Двовимірний тепловий потік можна записати так

$$\boldsymbol{Q} = \int \hbar\omega \boldsymbol{v}_{gr} \, n(T) d\Gamma \tag{4}$$

де $\mathbf{v}_{gr}$ — групова швидкість фононів

$$\boldsymbol{v}_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \boldsymbol{k}. \tag{5}$$

Величина **Q** (у Вт/м) — це потік енергії за одиницю часу та за одиницю довжини.

У рівняннях (1) – (5) у разі необхідності можна врахувати фонони різної поляризації.

Як джерела тепла ми розглядаємо резервуари тепла нескінченної теплоємності із заданими температурами: гарячий з температурою T_h і холодний з температурою T_c знаходяться в тепловому контакті з торцями H_0H_1 і C_0C_1 відповідно (див. рис. 1). Передбачається, що ці резервуари забезпечують постійну температуру на цих сторонах, а температурні контакти зі стінками є ідеальними. За цих умов тепловий потік, що випромінюється цими стінками, буде визначатися законом випромінювання абсолютно чорного тіла [8]:

$$Q_{BBR}(T) = \int \hbar\omega\, n(T)\left(\boldsymbol{v}_{gr}\boldsymbol{e}\right)d\Gamma = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} cos(\phi)d\phi \int_0^{\infty} \frac{kdk}{(2\pi)^2}\hbar\omega n(T)v_{gr}, \quad (6)$$

де **e** — нормаль до випромінюючої поверхні. Тут зручно ввести поняття ефективної швидкості фонона

$$V_{eff} = \frac{\int \hbar\omega v_{gr}(\omega)n(T)d\Gamma}{\int \hbar\omega\, n(T)d\Gamma}, \quad (7)$$

яке можна використати, щоб переписати вираз для усередненої густини теплового потоку від торцевих стінок таким чином:

$$Q_{BBR} = \frac{1}{\pi}V_{eff}E. \quad (8)$$

Тепер розглянемо різні випадки розсіяння фононів на бічних сторонах зразка.

2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ У НАНОСТРІЧКАХ ПРИ ДИФУЗНОМУ РЕЖИМІ ВЗАЄМОДІЇ ФОНОНІВ З ГРАНИЦЯМИ

Однією з проблем, що виникають при дослідженні теплопровідності фононних систем з низькою розмірністю при низьких температурах, є поява розбіжності у виразах для коефіцієнта теплопровідності як функції від розміру вибірки [1 – 4], а також наявність незвичайних залежностей теплових потоків від градієнтів температури [2, 5].

Наприклад, у загальноприйнятій моделі Казимира–Зімана [6, 7] передбачається, що на бічних поверхнях зразка зовнішніми джерелами створюється лінійний градієнт температури. Більше того, в моделі Казимира необхідні дві умови на межі, які відповідають так званій повній акомодації.

Перша умова передбачає дифузне відбиття, при якому фонон відбивається з ізотропною функцією кутового розподілу. Друга умова – це перерозподіл фононів залежно від енергії, щоб розподіл відбитих фононів відповідав випромінюванню ідеального чорного тіла – тобто відбиття фононів повинно бути непружним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою бокових стінок з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за наявності теплового контакту між бічними краями зразка та термальними ваннами, що мають задану розподіл температури. У випадку зразка з термоізольованими межами (наприклад, коли зразок знаходиться у вакуумі) або, принаймні, з недосконалим тепловим контактом, другу умову виконати практично неможливо.

Тут досліджується стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами зразків. Взаємодія фононів між собою вважається незначною, а бічні межі зразка вважаються термоізольованими.

Основною метою роботи є аналітичне дослідження радіаційного теплообміну фононів у 2D-зразках та його залежності від взаємодії з крайовими границями у випадку абсолютно ізотропного дифузного

розсіювання, тобто за повної відсутності дзеркального розсіяння. Така постановка задачі узагальнює, зокрема, результати роботи [8, 9] на двовимірний випадок і дає змогу розв'язувати задачу не лише чисельними методами [8 – 10], а й отримати аналітичні результати.

2.1. Абсолютне дифузійне пружне відбиття

Розглянемо тепер граничний випадок ізотропного дифузійного розсіювання на межі. У цій межі відбите випромінювання вважається повністю ізотропним незалежно від кута падіння фонона. Тобто функція розподілу відбитих фононів має прямокутну форму.

При цьому енергетичний розподіл фононів не змінюється, тобто відбиття вважається повністю пружним. Отже, взаємодія фонона з боковою стінкою не нагадує поглинання фонона з наступним випромінюванням, а є пружним відбиттям того ж фонона від достатньо шорсткої поверхні під рівномірно розподіленими кутами.

Таким чином, цей випадок відрізняється від моделі Казимира [6], в якій передбачається, що межа є абсолютним/ідеальним чорним тілом. У моделі [6] фонони не тільки ізотропно розподілені за напрямками, але, крім того, їх енергетичний розподіл відповідає рівноважному планківському розподілу.

2.2. Абсолютно поглинаюча межа

Для введення основних доданків розглянемо граничний випадок, коли бічні межі зразка є ідеальним поглинанням. Тут результуючий тепловий потік визначається лише фононами, які випускаються з гарячої стінки і потрапляють безпосередньо на холодну, і навпаки (без відбиття від бічних стінок). Ця чиста густина теплового потоку визначається лише різницею теплових потоків:

$$Q_0 = Q(H_0H_1 \to C_0C_1) - Q(C_0C_1 \to H_0H_1) = Q_{BBR}(T_h) \cdot R_0 - Q_{BBR}(T_c) \cdot R_0. \quad (9)$$

Форм-фактор R_0 дорівнює усередненому по ширині значенню $r_0(x)$.

$$R_0 = \frac{1}{W}\int_0^W r_0(x)\,dx, \tag{10}$$

а функція $r_0(x)$ — частка енергії, що випромінюється однією зі сторін, яка поширюється безпосередньо на іншу сторону без відбиття від бічних стінок (див., наприклад, лінію AB на рис. 1).

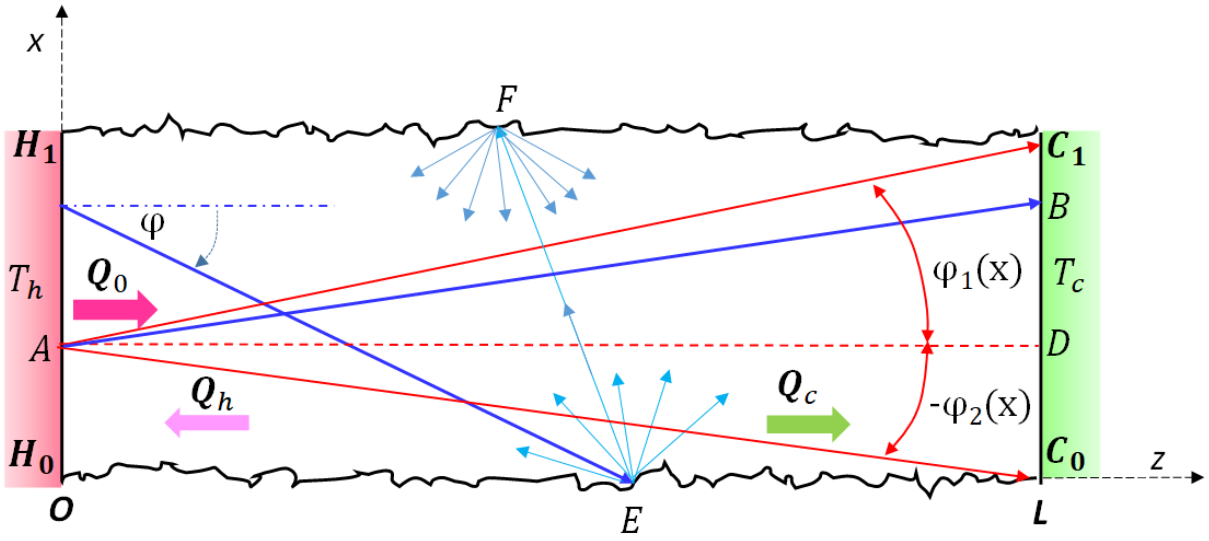


Рис.1. Геометрія задачі

Ця частка визначається ізотропністю випромінювання (6) та геометричними розмірами (і формою) зразка.

$$r_0(x) = \frac{\int_{-\phi_2}^{\phi_1} cos(\phi)d\phi \int_0^{\infty} \frac{kdk}{(2\pi)^2}\hbar\omega n(T)v_{gr}}{\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} cos(\phi)d\phi \int_0^{\infty} \frac{kdk}{(2\pi)^2}\hbar\omega n(T)v_{gr}} = \frac{\int_{-\phi_2}^{\phi_1} cos(\phi)d\phi}{\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} cos(\phi)d\phi} =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\int_0^{\phi_1} cos(\phi)d\phi + \int_0^{\phi_2} cos(\phi)d\phi\right) \tag{11}$$

Тут граничні кути є функцією x і визначаються співвідношеннями (див. рис. 1).

$$tg\phi_1 = \frac{W-x}{L} \quad \text{і} \quad tg\phi_2 = \frac{x}{L}. \tag{12}$$

Отже, для R_0 отримуємо наступний результат:

$$R_0 = \frac{\sqrt{W^2+L^2}-L}{W} = \frac{W}{\sqrt{W^2+L^2}+L}. \tag{13}$$

Із співвідношення (9) отримуємо для малих перепадів температур вираз:

$$Q_0 \approx \frac{1}{\pi} V_{eff} \frac{dE}{dT}(T_h - T_c)R_0 = \frac{1}{\pi} V_{eff} C_S (T_h - T_c)R_0 \tag{14}$$

Тепер можна ввести ефективну теплопровідність, як коефіцієнт пропорційності між щільністю теплового потоку і відношенням різниці температур до довжини зразка:

$$Q_0 = \kappa_{eff} \frac{(T_h - T_c)}{L} \tag{15}$$

Виявляється, теплопровідність приймає звичну для фононних систем форму:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_0. \tag{16}$$

Цей вираз містить інформацію про розмірність зразка (дві в знаменнику), теплоємність фононного газу, ефективну швидкість та ефективну довжину шляху фононів, що визначається як:

$$\Lambda_0 = \frac{2}{\pi} L R_0 = \frac{2}{\pi} \frac{LW}{\sqrt{W^2+L^2}+L}. \tag{17}$$

Для великих W та/або малих L наявністю бічних меж можна знехтувати, і тепловий потік виявиться рівним різниці потоків від гарячої та холодної кромок, незалежно від відстані L між ними.

$$Q_0 = C_S V_{eff} \frac{1}{\pi} (T_h - T_c) \tag{18}$$

Тут результат обумовлений відсутністю впливу бічних меж, оскільки фононних взаємодій з цими межами немає. Іншими словами, фононний транспорт є чисто балістичним і без зіткнень від гарячої ванни до холодної і навпаки.

Однак у протилежному випадку абсолютно дзеркального відбиття [7] фононів з бічними стінками наявність цих бічних стінок ще раз не впливає на кінцевий результат [6] і величина потоку не залежить від довжини зразок.

Ці граничні випадки мають ще одну спільну властивість. Це відсутність градієнта температури всередині зразка [9]. Іншими словами, температурна залежність від координати всередині зразка має бути представлена таким чином:

$$T(z) = \frac{T_h + T_c}{2} \tag{19}$$

Такий вираз для температури можна пояснити із симетрії задачі. Однак при цьому виникає питання визначення температури всередині зразка за відсутності термодинамічної рівноваги у фононній системі. Можливим способом визначення температури в цій ситуації є введення поняття термометра, який вимірює щільність теплового потоку. У цьому випадку виявляється температура абсолютно чорного тіла з такою ж щільністю потоку.

Тепер у разі малої W та/або великої L результуючий тепловий потік переважає шириною зразка, а середня вільна пробіг фононів визначається співвідношенням, подібним до відповідного виразу для 3D-зразків. в цій межі:

$$\Lambda_0 (W \to 0) = \frac{1}{\pi} W. \tag{20}$$

Тут необхідно обговорити два моменти. З одного боку, фізичний зміст виразу (20) визначається малим кутом, під яким, наприклад, холодний кінець

видно з точок на теплому кінці, а не реальним зменшенням середньої довжини вільного пробігу. кожного фонона. З іншого боку, величину (20) можна інтерпретувати як середню довжину вільного пробігу, усереднену за всіма фононами. Оскільки лише мала частина цих фононів досягає протилежного боку, їх довжина вільного пробігу виявляється меншою.

У цьому граничному випадку малого W та/або великого L слід звернути увагу на наявність градієнта температури, який дозволяє зробити висновок, що рівняння (15) можна переписати в диференціальній формі, яка діє в кожній точці зразка:

$$\boldsymbol{Q}_0(z) = -\kappa \nabla T(z). \qquad (21)$$

Цей вираз відповідає звичайній формі градієнта для теплового потоку. Тут виявляється головна проблема цього підходу. Тепловий потік (21) виявляється функцією координати через те, що бічні стінки не теплоізольовані, а підтримують постійну температуру. З цієї причини різниця теплових потоків на кінцях зразка представлена в (9) як бажаний тепловий потік, але не постійний тепловий потік по всій довжині зразка. Підсумовуючи, у цій задачі ми вивчаємо не теплопровідність зразка, а властивості всієї системи в цілому, на які істотно впливає тепловий контакт на бічних границях зразка.

Цей приклад показує, що відсутність теплоізоляції (фононні зіткнення) на бічних межах може призвести до суперечливих результатів при визначенні теплопровідності.

В експериментах такий тепловий контакт можливий, наприклад, через поверхню підкладки, на яку нанесений зразок. А для теорії необхідно ретельно сформулювати граничні умови. Зокрема, обговорення вимагає припущення про наявність лінійного градієнта температури на бічних межах. Це має місце в моделі Казимира [6]. У цій роботі далі досліджується можливість формування стаціонарного нерівноважного постійного теплового потоку лише за рахунок особливостей взаємодії фононів з бічними стінками зразка.

2.3. Ітераційне рівняння для розподілу температури

Тепер для простоти та зручності, використовуючи лінійне наближення (14) та враховуючи відсутність взаємодії між фононами, введемо нормований тепловий потік

$$q = \frac{Q - Q_{BBR}(T_c)}{Q_{BBR}(T_h) - Q_{BBR}(T_c)} \tag{22}$$

і нормалізовану температуру

$$t(z) = \frac{T(z) - T_c}{T_h - T_c}. \tag{23}$$

При такому нормалізації значення $q = 1$ відповідає випадку дзеркального відбиття, а нормовані температури ребер дорівнюють $t(L) = t_c = 0$ і $t(0) = t_h = 1$.

З математичної точки зору ми зміщуємо початок теплового потоку (і температуру) до відповідного значення, а потім їх нормалізуємо. З фізичної точки зору ми розглядаємо лише фонони, які випромінює гарячий край і для яких не існує відповідного фонона, випромінюваного холодним краєм.

Тепер, посилаючись на рис.1 і визначення форм-фактора (10), частина фононів, випромінюваних лівою (гарячою) стінкою, проходить прямо через протилежну холодну стінку (9), створюючи нормований тепловий потік:

$$q_{c0} = R_0 = \frac{1}{W}\left[\sqrt{W^2 + L^2} - L\right]. \tag{24}$$

Індекси «c0» вказують на те, що нормований тепловий потік приймається холодним кінцем, не зазнаючи взаємодії з бічними межами.

Інша частина фононів припадає на дві бічні межі. З цих фононів ті, які потрапляють на бічні стінки без проміжних відбитків, тобто для яких взаємодія з бічними стінками є першою після випромінювання (див. точку *E* на рис. 1), створюють на цій стінці потік енергії з густиною розповсюдження

$$\tilde{g}_1(z,\phi)dzd\phi = \frac{sin(\phi)}{2W}\Theta(\phi_m(z)-\phi)dzd\phi, \qquad (25)$$

де Θ – функція Хевісайда, φ – кут між імпульсом фонона та віссю зразка,

$$sin(\phi_m(z)) = \frac{W}{\sqrt{W^2+z^2}} \qquad (26)$$

це максимальний кут падіння фонона в точці з координатою z.

Для абсолютно ізотропних дифузних відбитків густина розподілу відбитих фононів буде визначатися співвідношенням

$$g_1(z,\phi) = g_1(z)\Theta(\pi-\phi) = \frac{1}{2W}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]\cdot\Theta(\pi-\phi) \qquad (27)$$

Частина цієї енергії повернеться до нагрівача, створюючи тепловий потік

$$q_{h1} = \int_0^L dz\frac{1}{2}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]g_1(z). \qquad (28)$$

Інша частина створить прямий тепловий потік через праву (холодну) стінку

$$q_{c1} = \int_0^L dz\frac{1}{2}\left[1-\frac{L-z}{\sqrt{W^2+(L-z)^2}}\right]g_1(z). \qquad (29)$$

Решта фононів потрапляє на протилежну бічну стінку і знову дифузійно відбивається від неї (точка *F* на рис. 1). Розподіл теплового потоку після цього наступного (другого) відбиття знову є ізотропним і має вигляд, який є функцією від *z*:

$$g_2(z) = \frac{1}{2}\int_0^L dz_1\frac{W^2}{[W^2+(z-z_1)^2]^{\frac{3}{2}}}g_1(z_1) \equiv Pg_1 \qquad (30)$$

Тут ми вводимо лінійний інтегральний оператор *P*:

$$Pg = \frac{1}{2}\int_0^L dz_1 \frac{W^2}{[W^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} g(z_1). \quad (31)$$

Загальний тепловий потік, що падає на бічну стінку за рахунок цих фононів, дорівнює:

$$q_{s1} = \int_0^L dz \frac{1}{2}\left[\frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} + \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right] g_1(z) \equiv \int_0^L dz\, g_2(z) \quad (32)$$

Очевидно, що співвідношення (28), (29) і (32) забезпечують збереження повної енергії

$$\int_0^L dz_1\, g_1(z_1) \equiv q_{h1} + q_{s1} + q_{c1} \quad (33)$$

Тепер за допомогою лінійного інтегрального оператора P (31) можна записати щільність розподілу теплового потоку від бічної межі, яка обумовлена тими фононами, які зазнають n – 1 дифузного відбиття:

$$g_n(z) = P^{n-1} g_1(z). \quad (34)$$

Отже, тепловий потік від бічних меж, що враховує внесок усіх фононів, тобто тих, що мають один, два, … відбиття, дорівнює

$$G(z) = g_1 + Pg_1 + P^2 g_1 + \ldots = \sum_{n=0}^{n=\infty} P^n g_1 \quad (35)$$

Рівняння (35) представляє нескінченну форму рівняння, яке описує розподіл температури вздовж зразка. При цьому кожному додатковому члену рівняння відповідає додаткова певна кількість відображень. Крім того, рівняння (35) можна також записати в явно ітераційній формі після наступних перетворень

$$G(z) = g_1 + Pg_1 + P^2 g_1 + \ldots = g_1 + P(g_1 + Pg_1 + \ldots) = g_1 + P(G) \quad (36)$$

Отже, ми можемо ввести ітераційну процедуру з початковим значенням і правилом для послідовних ітерацій:

$$G^{(n)}(z) = g_1 + PG^{(n-1)}. \quad (37)$$

При вирішенні рівняння (35), ми бачимо, що для великого відношення $W/L > 1$ необхідна невелика кількість ітерацій для збіжності розв'язку. З іншого боку, наприклад, коли $W/L = 100$, виявляється, що достатньо лише однієї ітерації. Іншими словами, достатньо одного дифузійного відбиття, щоб забезпечити стаціонарний розподіл температури. Цей розподіл виявляється майже рівномірним із температурою і дорівнює середньому середнім температурам гарячого та холодного джерела, заданим рівнянням. (19). Коли $W/L = 10$ потрібні дві ітерації, а розподіл температури відрізняється від постійного значення до 10 відсотків.

У протилежному граничному випадку дуже малого відношення W/L потрібна більша кількість ітерацій, щоб отримати рішення, які збігаються. Наприклад, коли $W/L = 0{,}1$ нам потрібно більше 70 ітерацій, а для $W/L = 0{,}01$ потрібно більше 2400 ітерацій.

2.4. Інтегральне рівняння для розподілу температури

Рівняння (35) можна переписати, щоб отримати інтегральне рівняння, розв'язком якого є функція $G(z)$:

$$G(z) = \frac{1}{2W}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right] + \frac{1}{2}\int_0^L dz_1 \frac{W^2}{[W^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} G(z_1). \quad (38)$$

Це інтегральне рівняння також можна отримати за допомогою іншого фізичного аргументу. Для цього можна просто ввести шукану невідому функцію $G(z)$ і накласти рівність потоків енергії в кожній точці бічної межі.

Співвідношення (38) добре підходить для отримання наближених аналітичних рішень для граничних випадків та/або для дослідження балансу теплового потоку в зразку.

Крім того, рівняння (38) для густин теплового потоку дозволяє отримати рівняння для температурного профілю $t(z)$, якщо використовувати запропоноване раніше визначення температури не взаємодіючого фононного газу як температури абсолютно чорного тіла, яке створює однакову щільність теплового потоку. Для отримання цього рівняння врахуємо, що щільність теплового потоку $g_1(z)$ (27), створювана нагрівачем на бічній стінці, залежить від температури нагрівача T_h (у лінійному наближенні) таким чином:

$$g_1(z) = \frac{1}{2W}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right] \propto \frac{T_h}{2}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right]. \qquad (39)$$

Таким чином, щоб отримати рівняння для безрозмірної температури $t(z)$ (23) з рівняння для густини теплового потоку $G(z)$ (38), достатньо помножити рівняння (38) на W і замінити добуток $WG(z)$ через $t(z)$. В результаті отримуємо наступне рівняння

$$t(z) = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right] + \frac{1}{2}\int_0^L dz_1 \frac{W^2}{[W^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} t(z_1). \qquad (40)$$

На рис. 2 наведено приклади розв'язків $t(z)$ для різних відношень W/L, а також з послідовними ітераціями (додаткові члени в рівнянні 37), що забезпечує збіжне рішення. Ми бачимо, що для чистого дифузійного чи квазібалістичного розсіювання ми ніколи не отримуємо суворої лінійної залежності [8, 12].

Отримане інтегральне рівняння (40) подібне до рівняння, знайденого в [5]. [8, 11] і являє собою узагальнення для випадку двовимірних вибірок.

З рівняння (40) випливає, що для дуже короткого зразка, тобто коли $W >> L$, температура $t(z) = 1/2$, що відповідає результату, заданому рівнянням (19).

Для будь-якого співвідношення *W*/*L* ми отримуємо значення t в середині вибірки:

$$t\left(z=\frac{L}{2}\right)=\frac{1}{2}. \tag{41}$$

Цей результат можна отримати із загальної властивості симетрії рівняння (40) відносно центру зразка:

$$t(z)=t(L-z). \tag{42}$$

Нарешті, можна показати, що в граничному випадку вузької вибірки рівняння (40) дає відому лінійну залежність для температури:

$$t(z)=1-\frac{z}{L}. \tag{43}$$

На рис. 3 (a) та (b) зображені відповідно дійсні розв'язки рівняння. (40), знайдена ітераційною процедурою, і наближена лінійна залежність, задана рівнянням. (43). Ці цифри демонструють суттєве зменшення *t*(*z*)–1/2 зі зменшенням відношення *W*/*L*.

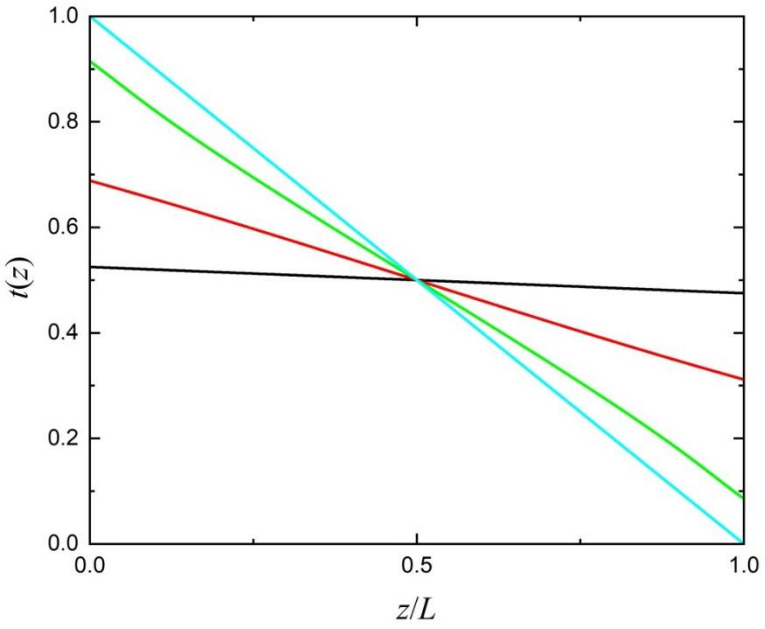


Рис.2 а. Рішення ітераційного рівняння. (36) для різних співвідношень *L* і *W* для різної кількості N_{it} ітерацій. Чорна лінія означає *W*/*L* = 10, червона лінія

– W/L = 1, а зелена лінія – W/L = 0,1. Синій лінією показано лінійну залежність (43).

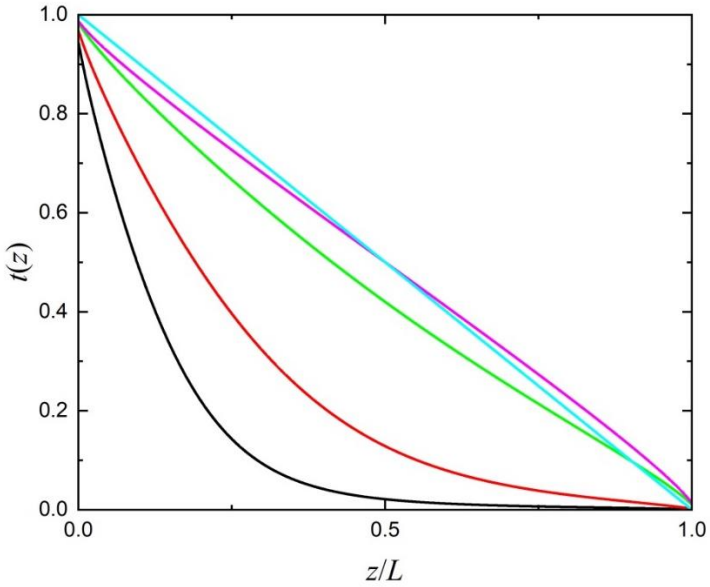
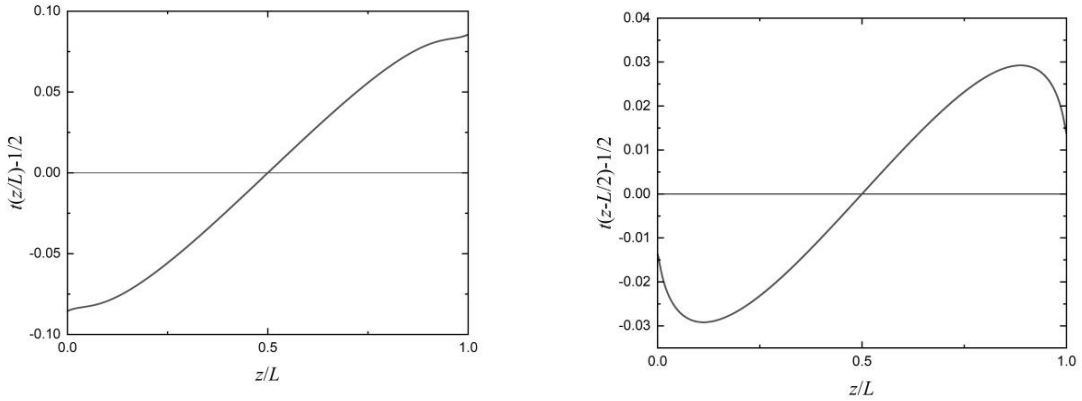


Рис.2 б. Рішення ітераційного рівняння. (36) для співвідношення W/L = 0,01 для різної кількості N_{it} ітерацій. Чорна лінія виходить з N_{it} = 100, червона лінія з N_{it} = 300, зелена лінія з N_{it} = 1200, пурпурна лінія відноситься до кінцевого рішення з N_{it} = 2400. Синя лінія показує ідеально лінійну залежність (43).



a) W/L = 0.1 b) W/L = 0.01

Рис.3. Різниця точного ітераційного рішення (суцільна крива) та наближеного лінійного розв'язку, заданого рівнянням. (36) (суцільна горизонтальна лінія) для різних значень відношення W/L.

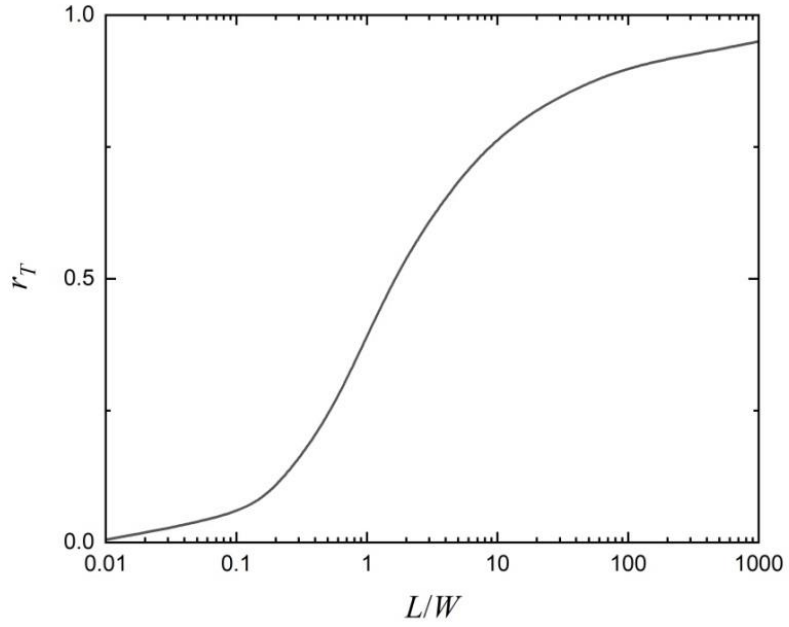


Рис. 4. Відношення градієнта температури в центрі зразка до різниці температур між нагрівачем і охолоджувачем, поділеним на відстань між ними, як функція L/W.

На рис. 4 показано, що ще однією суттєвою особливістю отриманого рішення є нестрога лінійність розподілу температури навіть при дуже великих L. В результаті цього ефекту градієнт температури в центрі зразка відрізняється від градієнта температури. отримано як різницю температур між нагрівачем і охолоджувачем, поділеною на відстань L між ними:

$$r_T = \frac{dT(z)/dz|_{z=L/2}}{(T_h - T_c)/L} < 1 \qquad (44)$$

З цієї причини для правильного визначення коефіцієнта теплопровідності важливо розташування термометрів. Рис.4. показує залежність відношення r_T (рівня 44) від співвідношення L/W.

Для дуже коротких і широких вибірок цей ефект очевидний (див. рівняння (19)). Однак для довгих зразків цей результат досить незвичайний.

Наприклад, для випадку $L/W = 10$ похибка визначення коефіцієнта теплопровідності через неправильне врахування розташування термометрів може досягати 23%.

2.5. Баланс теплового потоку

Виявлене рішення для функції $G(z)$ дозволяє розглянути баланс теплового потоку та розподіл температури всередині зразка. Загальний внесок усіх фононів у зворотний тепловий потік до гарячої стінки q_h і тепловий потік прямого потоку через холодну стінку q_c визначається співвідношеннями, подібними до (28) і (29), і виражається як:

$$q_h = \int_0^L dz \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right] G(z), \tag{45}$$

$$q_c = q_{c0} + \int_0^L dz \frac{1}{2}\left[1 - \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right] G(z). \tag{46}$$

Крім того, співвідношення з рівняння (38) дає змогу перевірити закон збереження енергії

$$q_h + q_c = 1. \tag{47}$$

Для цього достатньо обчислити інтеграл виразу (38) по всій довжині зразка, тобто визначити повну енергію, що падає на (і відбивається від) бічних стінок

$$\int_0^L G(z)dz = \int_0^L g_1(z)dz + \frac{1}{2}\int_0^L dz \int_0^L dz_1 \frac{W^2}{[W^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} G(z_1). \tag{48}$$

Розрахунок у r.h.s. інтегралів по z, отримуємо:

$$\int_0^L G(z)dz = 1 - q_{c0} + \frac{1}{2}\int_0^L dz G(z)\left(\frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} + \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right). \tag{49}$$

Нарешті, використовуючи рівняння. (45) і (46), отримуємо шуканий закон збереження (47).

Використання рівняння (38) можна визначити явний вираз для нормованого теплового потоку вздовж зразка

$$q(z) = q_r(z) - q_l(z). \tag{50}$$

Тут

$$q_r(z) = \frac{1}{W}\left(\sqrt{W^2 + z^2} - z\right) + \int_0^z dz_1 \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z - z_1}{\sqrt{W^2 + (z - z_1)^2}}\right] G(z_1) \tag{51}$$

це тепловий потік, спрямований вправо за рахунок фононів від нагрітого кінця і відбитий від бічних стінок від точок з координатою z_1 меншою за z; і

$$q_l(z) = \int_z^L dz_1 \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z_1 - z}{\sqrt{W^2 + (z_1 - z)^2}}\right] G(z_1) \tag{52}$$

це тепловий потік, спрямований ліворуч за рахунок фононів, відбитих від бічних стінок від точок з координатою z_1, більшою за z.

У цьому випадку на кінцях вибірки задовольняються очевидні співвідношення:

$$q_r(0) = 1 \tag{53}$$

тобто дорівнює початковому потоку;

$$q_r(L) = \frac{1}{W}\left(\sqrt{W^2 + L^2} - L\right) + \int_0^L dz_1 \frac{1}{2}\left[1 - \frac{L - z_1}{\sqrt{W^2 + (L - z_1)^2}}\right] G(z_1) = q_c. \tag{54}$$

$$q_l(0) = \int_0^L dz_1 \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z_1}{\sqrt{W^2 + z_1^2}}\right] G(z_1) = q_h. \tag{55}$$

З цих співвідношень випливає, що рівність теплових потоків на кінцях зразка можна записати так:

$$q(z=0) = q_r(0) - q_l(0) \equiv 1 - q_h \text{ та } q(z=L) = q_r(L) - q_l(L) \equiv q_c. \quad (56)$$

Отже

$$q(z=L) = q(z=0) \equiv q. \quad (57)$$

Крім того, співвідношення (38) дозволяє переконатися, що тепловий потік не залежить від координати z. Для цього потрібно просто диференціювати співвідношення (51) і знову скористатися інтегральним рівнянням (38), щоб переконатися, що ця похідна дорівнює нулю. Отже, ми отримуємо, що

$$q(z) = q_r(z) - q_l(z) = q = const. \quad (58)$$

Постійний тепловий потік уздовж зразка залежить від теплоізоляційного характеру взаємодії фононів з бічними межами.

2.5. Обговорення коефіцієнта ефективної теплопровідності

Переходимо до розгляду коефіцієнта теплопровідності. Найбільш очевидним визначенням цього коефіцієнта є інтегральне визначення коефіцієнта за рівнянням (15)

$$Q = \kappa_{eff} \frac{(T_h - T_c)}{L}. \quad (59)$$

Це визначення обґрунтовується постановкою самої задачі, в якій задаються температури нагрівача і охолоджувача, а також досліджується результуючий тепловий потік. Як обговорюється в частині 3 (див. рівняння (15) – (16)), ефективний коефіцієнт теплопровідності можна виразити таким чином:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_{eff} \quad (60)$$

Для обговорення отриманих результатів і для порівняння між граничними випадками введемо безрозмірний ефективний вільний пробіг фонона, який визначається як ефективний середній вільний пробіг фонона, нормований щодо ширини *W*:

$$\Lambda = \frac{\pi}{2}\frac{\Lambda_{eff}}{W} \tag{61}$$

Вираз для ефективного коефіцієнта теплопровідності має вигляд:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{\pi} C_S V_{eff} W \Lambda. \tag{62}$$

Використання рівняння (49) ми знаходимо явний вираз для нормалізованого ефективного середнього вільного пробігу для загального випадку:

$$\Lambda = \frac{L}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} + \frac{L}{W^2}\int_0^L dz \left[1 - \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right] t(z). \tag{63}$$

Перший доданок у (63) описує внесок фононів, які безпосередньо падають з нагрівача в холодну ванну (траєкторія AB на рис. 1). При зменшенні розміру ширини W вибірки цей доданок прагне до постійного значення, яке за обраною нами нормалізації дорівнює половині (див. рис. 5); і відповідає результату (14)-(17).

Другий член визначається внеском фононів, які мають багаторазове відбиття від бічних стінок. Якщо функція *t*(*z*) є лінійною, як показує рівняння. (43), цей член відповідає межі Казимира та рівнянню. (63) дає вираз:

$$\Lambda_C = \frac{1}{2}\frac{L}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} + \frac{1}{2} ln\left(\frac{\sqrt{W^2 + L^2} + L}{W}\right). \tag{64}$$

Цей результат має логарифмічну розбіжність

$$\Lambda_C\left({}^{W}/_{L} \to 0\right) = \frac{1}{2} ln\left({}^{L}/_{W}\right). \quad (65)$$

Рівняння (65) є аналогом відомої логарифмічної розбіжності [13], отриманої для нескінченного ($L \to \infty$) прямокутного стрижня з великим відношенням ширини *W* до товщини *D*.

Тепер, використовуючи точний розв'язок *t*(*z*), заданий рівнянням. (33), можна отримати нормовану середню вільний пробіг, залежність якої від співвідношення *W*/*L* задається аналітичним виразом Λ_a, що має вигляд:

$$\Lambda_a = \frac{4}{5} ln\left(\frac{\sqrt{W^2 + L^2} + L}{W}\right). \quad (66)$$

З'являється відносно сильна різниця (до двох разів), незважаючи на дуже хороший збіг між дійсною функцією *t*(*z*) (рівняння (40)) та її лінійною апроксимацією (рівняння (43)), за винятком дуже малий W/L (див. рис. 2 (a)-(b) і 3 (a)-(b)). Справа в тому, що ці функції відрізняються лише поблизу кінців; і інтеграл в рівнянні (63), що визначає тепловий потік, включає різницю між одиницею та виразом поблизу цих кінцевих точок. В результаті ми отримуємо практично однаковий температурний градієнт, але різні значення для обох – теплового потоку і середньої довжини; і, відповідно, коефіцієнт теплопровідності.

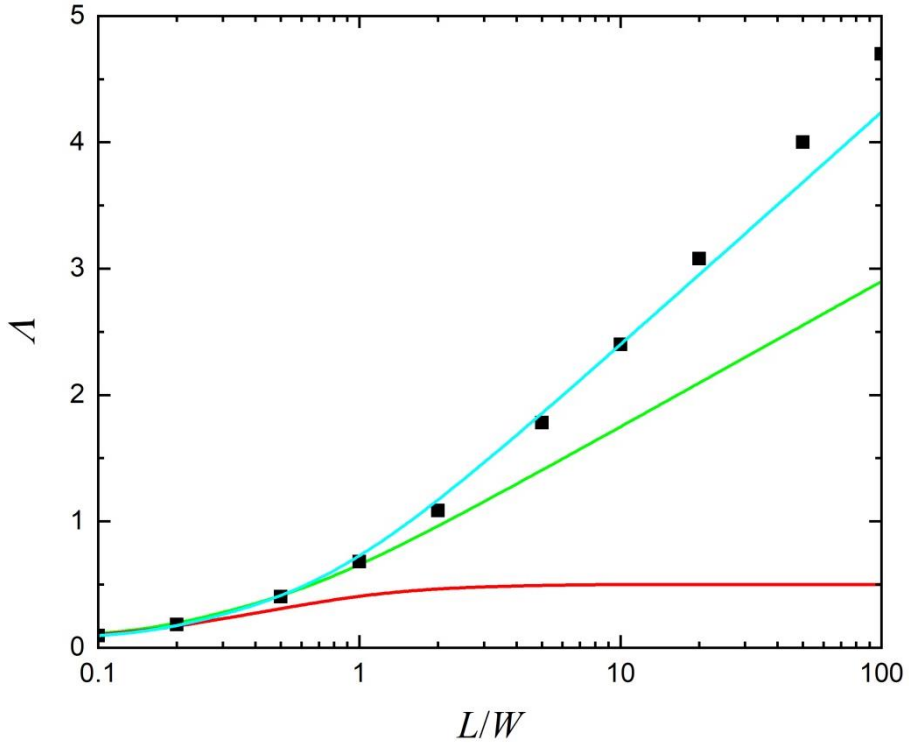


Рис. 5. Залежність нормованої середньої довжини вільного пробігу від співвідношення L/W в різних моделях. Окуляри показує розв'язок рівняння (38), синя лінія представляє аналітичне наближення, задане рівнянням. (66), зелена лінія описує межу Казимира, задану рівнянням. (64), а червона лінія показує випадок абсолютно поглинаючих меж, заданих рівнянням. (17).

Для порівняння на рис. 5 наведено залежності нормованих середніх вільних пробігів для різних моделей: ітераційне рішення, задане рівнянням. (38), його аналітичне наближення задається рівнянням. (65), модель Казимира з лінійною температурною залежністю, заданою рівнянням. (64) і граничний випадок абсолютно дзеркального відбиття.

Ще одна відмінність з'являється між результатами, отриманими за допомогою нашого підходу, і моделлю Казимира, коли ми розглядаємо ефективну довжину вільного пробігу фононів будь-якої природи. Ці ефективні середні вільні пробіги можуть бути зумовлені будь-якими процесами питомого опору Λ_R або будь-якими внутрішніми процесами у фононній системі Λ_N

У моделі Казимира джерелом фононів, які в кінцевому підсумку потрапляють на холодний кінець, є випромінювані бічні стінки, на яких градієнт температури задають зовнішні джерела. Тому лінійні розміри зразка W і L порівнюються з довжиною вільного пробігу фононів $\Lambda_{R,N}$.

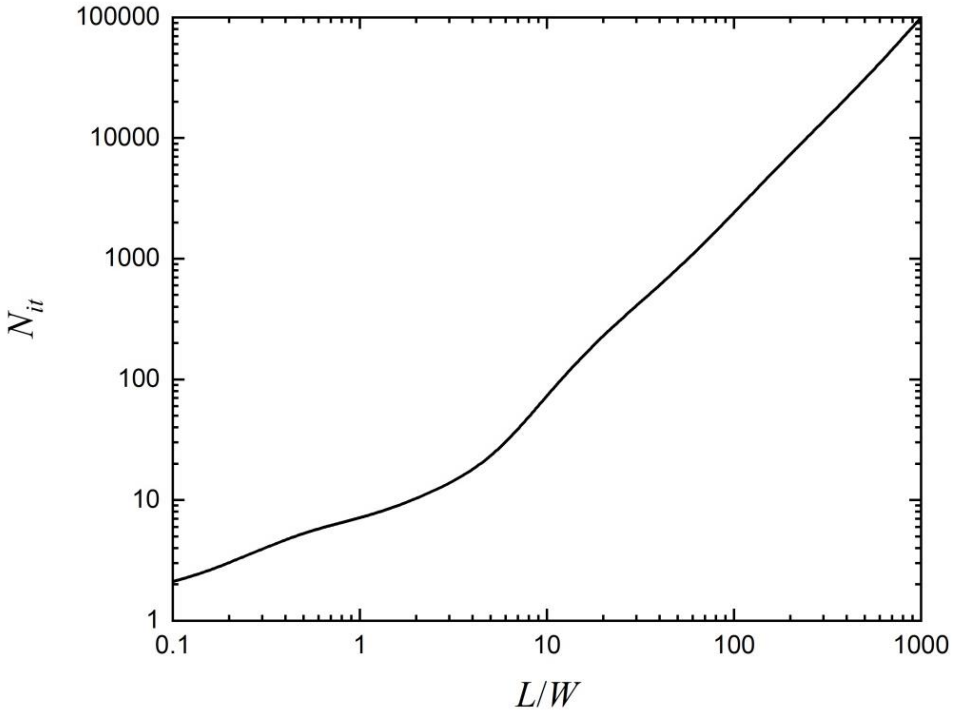


Рис. 6. Зростання кількості ітерацій як функція від L/W.

У нашому підході фонони випромінюються нагрівачем, а потім мають численні пружні ізотропні відбиття на бічних стінках, поки не буде досягнуто стаціонарний розподіл температури. Кількість цих відображень N_{refl} можна визначити з ітераційного рівняння. (38) як кількість ітерацій, необхідних для збіжності розв'язку. Як показано на рис. 6, це число зростає зі зменшенням ширини зразка W, набагато швидше, ніж відношення L/W. Тому середні вільні пробіги фононів $\Lambda_{R,N}$ слід порівнювати з дуже великою довжиною порядку:

$$\Lambda_{eff} > N_{refl} \cdot W \tag{67}$$

Отже, можлива така ситуація, коли

$$W << L << \Lambda_{R.N} << \Lambda_{eff}, \tag{68}$$

тобто середня довжина вільного пробігу фононів набагато більша за розмір вибірки, але набагато менша за відстані, на які повинен переміщатися фонон, відбиваючись від бічних сторін до утворення лінійної температурної залежності, необхідної для застосування Модель Казимира. У такій ситуації залежність коефіцієнта теплопровідності від розмірів може сильно відрізнятися від логарифмічної розбіжності, характерної для моделі Казимира, і навіть зменшуватися зі збільшенням довжини зразка.

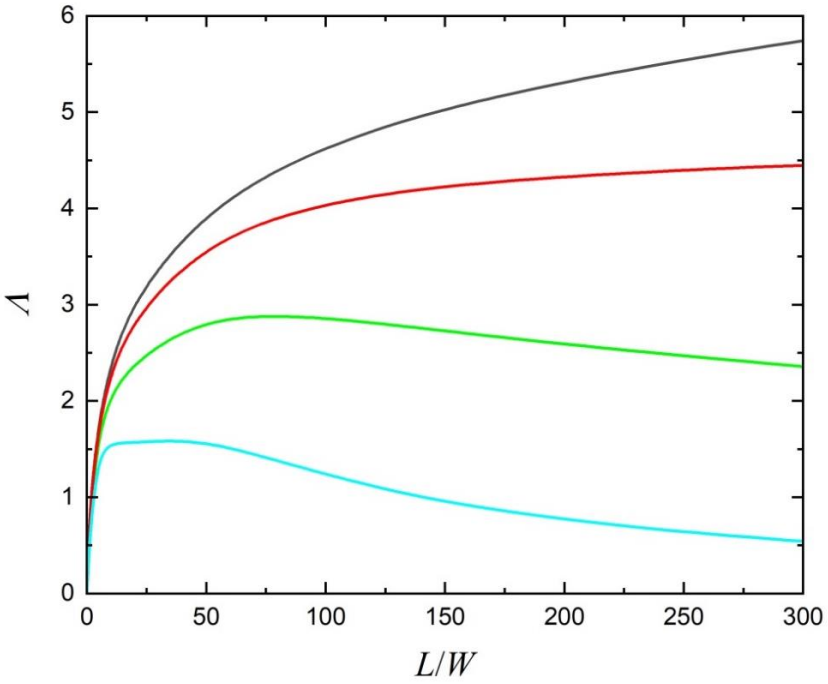


Рис. 7 . Залежність коефіцієнта теплопровідності від співвідношення L/W для різного значення ефективної довжини вільного пробігу фононів: а) $\Lambda R,N / L = 25$ (синя лінія), б) $\Lambda R,N / L = 70$ (зелена лінія) , в) $\Lambda R,N / L = 250$ (червона лінія). Суцільна лінія відноситься до випадку нескінченного $\Lambda_{R,N}$ і є розв’язком рівняння. (38).

2.7. Висновки до розділу

У розділі розглянуто проблему формування стаціонарного теплового потоку та стаціонарного нерівноважного розподілу температури в системі не взаємодіючих фононів двовимірних зразків довільних розмірів.

Як закон відбиття фононів від країв зразка запропоновано пружні ізотропні дифузні відбиття (25), при яких фонон відбивається без зміни його енергії, але в довільному напрямку, незалежно від напрямку падіння. Отримано та розв’язано інтегральне рівняння (38), що описує стаціонарний розподіл температури. Знайдений розподіл у загальному випадку відрізняється від лінійного (рис. 2 (а)-(б), 3 (а)-(б)).

Нелінійна температурна залежність призводить до того, що градієнт температури всередині зразка не збігається з відношенням різниці температур між нагрівачем і охолоджувачем, до відстані між ними. З цієї причини при визначенні коефіцієнта теплопровідності необхідно правильно враховувати розташування термометра в зразку (рис. 4). Такий результат, природно, відповідає результату 8.

Для вузьких і довгих зразків отриманий розподіл має тенденцію до лінійного, але тепловий потік завжди суттєво відрізняється від розрахованого у випадку лінійної залежності (рис. 5).

Ітераційне рішення (36) основного інтегрального рівняння (38) дозволяє визначити кількість дифузних фононних відображень, необхідних для створення стаціонарного стану (рис. 6), і тим самим визначити ефективну довжину вільного пробігу фонона, яка повинна бути порівняно з довжиною вільного пробігу через можливі процеси фононної взаємодії. У результаті залежність теплового потоку та коефіцієнта теплопровідності від розмірів зразка є по суті немонотонною (рис. 7).

3. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ У НАНОСТРІЧКАХ ПРИ ПОВНІСТЮ ДЗЕРКАЛЬНОМУ ВІДБИТТІ ФОНОНІВ

3.1. Абсолютно дзеркальна межа

Розглянемо граничний випадок абсолютно дзеркальних бічних стінок нанострічки. Всі фонони, випромінювані з гарячого та холодного кінців зразка, без втрат досягають протилежних боків. З цього можемо зробити очевидний висновок щодо незалежності теплового потоку від довжини провідника. У цьому випадку теплопровідність, яка лінійно зростає з довжиною, визначатиметься співвідношенням

$$Q_0 = \kappa_{eff} \frac{(T_h - T_c)}{L}. \tag{69}$$

Тут κ_{eff} – це ефективний коефіцієнт теплопровідності, який за фактом є коефіцієнтом пропорційності між щільністю теплового потоку та відношенням різниці температур до довжини зразка.9

Коефіцієнт теплопровідності має звичайний для фононних систем вигляд:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_0. \tag{70}$$

Ця формула включає в себе відомості про двовимірну розмірність провідника, термодинамічні та транспортні властивості фононів:

$$\Lambda_0 = \frac{2}{\pi} L R_0. \tag{71}$$

Близький вираз отримаємо з (70) у граничному випадку малого Λ.

Якщо припустити, що всі фонони відбиваються від бічних стінок без втрат, то той самий результат ми можемо отримати і аналітичним способом, використовуючи метод зображень для обліку всіх відображень. У цьому методі, замість траєкторії фонону, який відбивається від бічної стінки, ми графічно добудовуємо уявне продовження шляху фонону без відбиття від

межі, як зазначено на рис. 1. Таким чином, випромінений нагрівачем потік фононів, що відобразився від бічних стінок точно *n* разів, має вигляд:

$$Q_h^{(n)} = Q(H_0H_1 \to C_nC_{n+1}) + Q(H_0H_1 \to C_{-n}C_{-n+1}) = \\ = 2Q(H_0H_1 \to C_nC_{n+1}) \quad (72)$$

Аналогічно для потоку фононів від охолоджувача

$$Q_c^{(n)} = Q(C_0C_1 \to H_nH_{n+1}) + Q(C_0C_1 \to H_{-n}H_{-n+1}) = \\ = 2Q(C_0C_1 \to H_nH_{n+1}), \quad (73)$$

тут $n = 1,2,3\ldots$, завдаються такими співвідношеннями:

$$Q_h^{(n)} = Q_{BBR}(T_h) \cdot (R_n - R_{n-1}) \quad \text{і} \quad Q_c^{(n)} = Q_{BBR}(T_c) \cdot (R_n - R_{n-1}). \quad (74)$$

Величини R_n визначаються інтегралом, аналогічним (13)

$$R_n = \frac{1}{W}\int_0^W dx \int_0^{\varphi_n(x)} \cos(\varphi)\, d\varphi. \quad (75)$$

але з іншими межами (лімітами) кутової змінної:

$$sin\,\phi_n\,(x) = \frac{(n+1)W - x}{\sqrt{((n+1)W - x)^2 + L^2}}. \quad (76)$$

У результаті

$$R_n = \frac{1}{W}\left(\sqrt{(n+1)^2W^2 + L^2} - \sqrt{n^2W^2 + L^2}\right). \quad (77)$$

З отриманого співвідношення вочевидь випливає, що у випадку дзеркального відображення, відповідні частини виразу нівелюють одна одну, якщо ми підсумуємо величини (72) або (73):

$$Q = \sum_0^\infty Q_n = Q_{BBR}\left(R_0 + \sum_1^\infty [R_n - R_{n-1}]\right) = Q_{BBR}R_\infty \equiv Q_{BBR} \quad (78)$$

Тут у якості граничного значення R_n використовуємо $R_\infty = 1$, за умови, що n наближається до нескінченності.

Отримані вирази досить очевидні і явно вказують на неможливість створення градієнта температури всередині зразка за відсутності резистивних процесів. З огляду на цей факт, приступимо до розгляду можливих резистивних процесів на межах, які вплинуть на утворення градієнта температури, і, як наслідок, на кінцеве значення коефіцієнта теплопровідності.

3.2. Кінцева кількість відбиттів

Розглянемо найпростішу модель таких процесів. Нею буде випадок з обмеженою кількістю відображень N. У цьому випадку залишиться лише останнє значення R_n:

$$Q_N = \sum_0^N Q_n = [Q_{BBR}(T_h) - Q_{BBR}(T_c)] \cdot R_N = \\ = \frac{\Delta Q}{W}\left(\sqrt{(N+1)^2W^2 + L^2} - \sqrt{N^2W^2 + L^2}\right). \quad (79)$$

Введемо нормалізований тепловий потік для зручності наступного обговорення, безпосередньо пов'язаний з ефективним середнім вільним шляхом фононів:

$$q = \frac{Q_N}{\Delta Q} = \frac{\pi}{2L}\Lambda \quad (80)$$

Звідси випливає, що для кінцевої кількості відображень такий тепловий потік матиме вигляд

$$q_N = \frac{(2N+1)W}{\sqrt{(N+1)^2W^2 + L^2} + \sqrt{N^2W^2 + L^2}} \quad (81)$$

Якщо N наближається до нескінченності, ми отримуємо граничний випадок повністю дзеркальних відображень (78)

$$q_{spec} = 1 \tag{82}$$

який не залежить від розмірів зразка.

У ліміті, коли N є малим, внесок віддзеркалень є малим, тобто

$$q_{norefl} = 1. \tag{83}$$

Для гранично довгих та вузьких провідників здобуваємо

$$q_{N0} = \frac{2N+1}{2}\frac{W}{L}. \tag{84}$$

Як наслідок, довжини вільго пробігу маємо

$$\Lambda_{N0} = \frac{2N+1}{\pi}W \tag{85}$$

отримане значення визначатиметься шириною N-кратного зразка.

3.3. Приклад поглинання на межі

Іншою простою моделлю резистивних процесів, яку ми розглянемо, є абсорбція на границі, при якій кут відбиття фонона тотожній куту падіння, а густина зменшується в $(1-p)$ разів. У цьому випадку значення p тотожно ймовірності абсолютно дзеркального відображення. Звідси випливає вираз для теплового потоку у вигляді суми нескінченного ряду, який сходиться

$$q_p = q_0 + \sum_1^\infty q_n p^n =\cdot R_0 + \sum_1^\infty (R_n - R_{n-1})p^n. \tag{86}$$

Загалом, можливо отримати простіший вираз, якщо змінити умови:

$$q_p = R_0(1-p) + (1-p)\sum_1^\infty R_n p^n =$$

$$= (1-p)\left[\frac{W}{\sqrt{W^2+L^2}+L} + \sum_1^\infty \frac{(2n+1)W}{\sqrt{(n+1)^2W^2+L^2}+\sqrt{n^2W^2+L^2}}p^n\right]. \tag{87}$$

Для великих W ми одержали прогнозовані результати

$$q_{p\infty} = (1-p)\left[1 + \sum_{1}^{\infty} p^n\right] = (1-p)\left[1 + \frac{p}{1-p}\right] = 1, \qquad (88)$$

У разі довгого і вузького зразка ми маємо

$$q_{p0} = (1-p)\frac{W}{2L}\left[1 + \sum_{1}^{\infty}(2n+1)p^n\right] = \frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}, \qquad (89)$$

і для ефективного пробігу фононів

$$\Lambda_{p0} = \frac{W}{\pi}\frac{1+p}{1-p} = \Lambda_0\frac{1+p}{1-p}. \qquad (90)$$

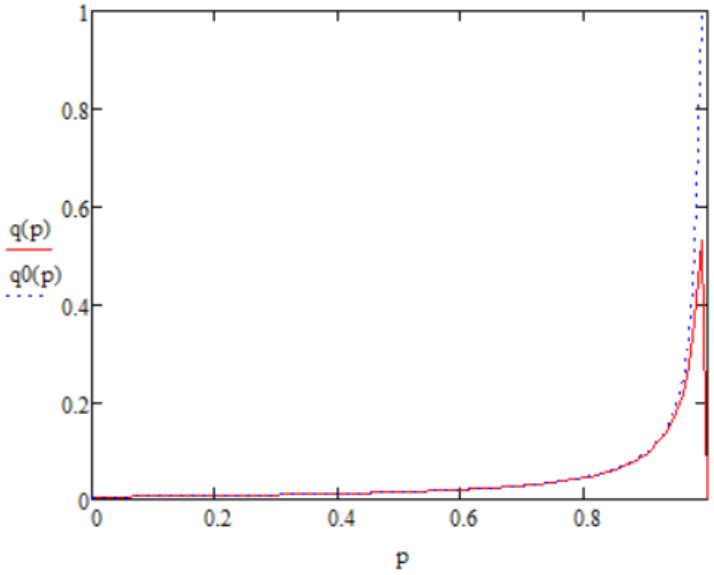


Рис. 8. Апроксимація для вузького і довгого зразка

На жаль, у використаному нами підході отримані результати не задовольняють дійсності з тієї причини, що настає момент, коли відношення W/L починає збільшуватися, незалежно від того, наскільки вузьким є провідник. Для уникання розбіжності суми ряду, запропоновано наступну формулу апроксимації

$$q_{p0app} = \frac{\frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}}{1+\frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}} = \frac{W(1+p)}{2L(1-p)+W(1+p)}, \qquad (91)$$

За допомогою якої с великою точністю була описана реальна сума (87). Результати ефективності апроксимації були представленні на рис. 9.

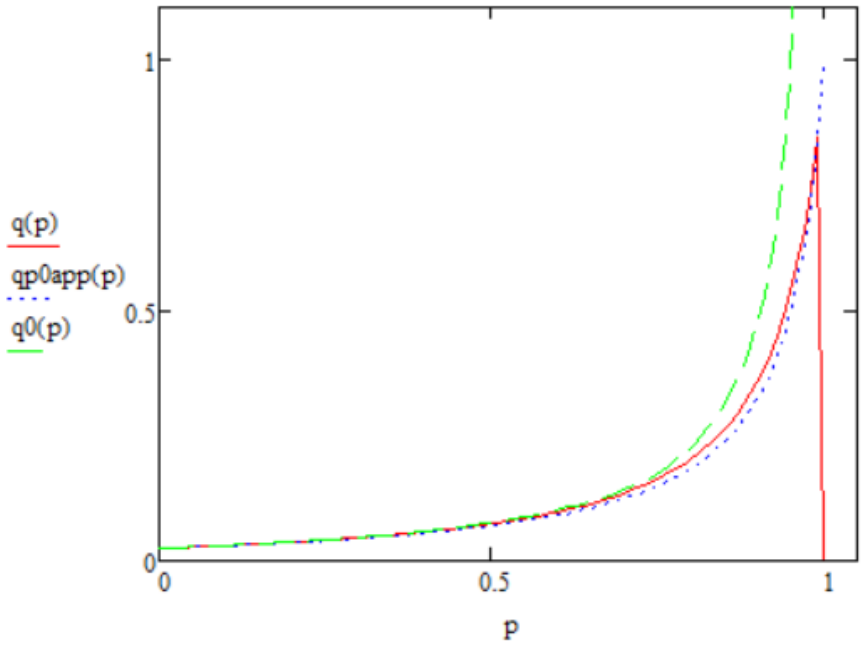


Рис. 9. Порівняння апроксимацій (89) та (91)

Як наслідок, для середньої фононної довжини ми здобуваємо таку рівність

$$\Lambda_p = \Lambda_0 \frac{1}{\frac{1-p}{1+p}+\frac{W}{2L}}, \qquad (92)$$

який може бути використаний у повному діапазоні значення p та співвідношенні W/L ширини та довжини зразка.

3.4. Висновки до розділу

У цьому розділі були розглянуті окремі випадки перенесення тепла всередині провідника, за умови, що система знаходиться в балістичному режимі, тобто ми нехтуємо взаємодією фононів один з одним. Тут потік тепла визначається лише взаємодією фононів із стінками нанострічки.

Використовуючи метод зображень у разі абсолютно дзеркальних стінок зразка, ми отримали очевидний результат, що все тепло, що надходить із теплого кінця, без втрат досягає холодної стінки, і, таким чином, ми переконалися у неможливості створити градієнт температури за відсутності резистивних процесів усередині зразка.

Розглядаючи випадок з кінцевим числом відбиття від бічних стінок зразка, ми отримали різні наближені вирази, що описують цей випадок. Також ми визначили, що довжина вільного пробігу фононів у разі буде визначатися шириною N-кратного зразка.

Крім цього, нами було розглянуто випадок поглинання фононів на межі нанострічки. Ми ввели величину, аналогічну ймовірності абсолютно дзеркального відображення, яка згодом стала визначальною при визначенні теплового потоку у зразку та ефективної довжини вільного пробігу фононів. Також ми отримали апроксимації для різних типів зразків.

4. ЗАГАЛЬНИЙ ВИПАДОК КОМБИНОВАНОГО МЕХАНИЗМУ ВЗАЄМОДІЇ

У цьому розділі досліджуються фізичні механізми розсіювання фононів на межах кінцевого зразка в двовимірному випадку та їх вплив на теплопровідність зразка. Запропоновано аналітичну модель теплопровідності двовимірного фононного газу в двовимірних зразках кінцевих розмірів. Основною метою роботи є розгляд фізичних механізмів, що забезпечують перехід від дзеркальних граничних умов до повністю дифузійних. Зокрема, запропоновано модель для ефективного обліку шорсткості для граничних випадків слабкого та абсолютного дифузного розсіювання та проведено порівняння з існуючими моделями.

4.1. Аналітична модель.

У загальноприйнятій моделі Казимира [14, 15] передбачається, що на бічній поверхні зовнішніми джерелами створюється лінійний температурний градієнт. Більше того, в моделі Казимира необхідні дві умови на межі. Це дифузне відбиття, при якому відбивається фонон без зміни енергії з ізотропною функцією розподілу. Друга умова — перерозподіл фононів за енергією, щоб розподіл відбитих фононів відповідав випромінюванню повністю чорного тіла — тобто відбиття фононів має бути непружним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою меж з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за наявності теплового контакту між бічними краями зразка та теплового середовища, і при заданому розподіл температури. У разі термоізольованих меж зразка (наприклад, коли зразок знаходиться у вакуумі) або, принаймні, з недосконалим тепловим контактом, друга умова практично неможлива.

У цій роботі досліджується стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами

зразків. При цьому взаємодія фононів між собою вважається незначною, а бічні межі зразка вважаються термоізольованими.

Для розгляду цієї задачі введемо падаючі $F_{inc}(z, \varphi)$ і відбиті $F_{ref}(z, \varphi)$ теплові потоки на бічній межі, які є функціями координати та напрямку, і розв'язуємо систему інтегральних рівнянь для цих функцій:

$$F_{inc}(z,\phi) = g_h(z,\phi) + F_{ref}(z - Wctg\phi, \phi)\eta(0 < z - Wctg\phi < L) \quad (93)$$

$$F_{ref}(z,\phi) = pF_{inc}(z,\phi) + \frac{1}{2}(1-p)\eta(\pi - \phi)\int_0^{\pi} F_{inc}\left(z,\tilde{\phi}\right)\widetilde{sin\,\phi}\, d\tilde{\phi} \quad (94)$$

де $g(z, \varphi)$ – потік фононів, які рухаються безпосередньо від нагрівача, а p – коефіцієнт дзеркального відбиття. У разі повного дифузійного розсіювання ($p = 0$) отримуємо результат, отриманий у [16].

Цю систему можна розв'язати як ітераційним методом, так і наближено аналітично. Отримані рішення описують баланс теплових потоків, розподіл температури у зразку та залежність ефективного коефіцієнта теплопровідності від розміру зразка.

Таким чином, запропоновані методи обліку послідовних фононних відображень від меж з довільними рівнями шорсткості дозволяють визначити умови застосовності для існуючих моделей теплопровідності кінцевих розмірів малорозмірних зразків.

4.2. Методика числового розв'язання проблеми

На основі проведених обчислень, пов'язаних з випадком абсолютно дзеркального відображення і випадком дифузного відображення від меж зразка, ми склали модель, яка включає обидва режими. Коефіцієнт p у представленому нами аналітичному виразу (94) для відбитого теплового потоку виступає у ролі ймовірності такого відображення. Отже, вираз $1 - p$ є ймовірністю того, що відображення поверхні буде дифузним.

Моделювання теплових потоків ми проводили у системі комп'ютерної алгебри Mathcad методом ітерацій. Початковий тепловий потік падаючих фононів ми представили як f0inc(z, fi) (див. рис. 10):

Step 0

$$f0inc(z,fi) := \frac{1}{W}\cdot if\left(\frac{W}{\sqrt{W\cdot W + z\cdot z}} - \sin(fi) > 0 \wedge \cos(fi) > 0, 1, 0\right)$$

$$f0ref(z,fi) := p\cdot f0inc(z,fi) + (1-p)\cdot\left(\frac{1}{2}\cdot\int_0^{\pi} f0inc(z,fi)\cdot\sin(fi)\,dfi\right)$$

$$F0INC_{n,m} := f0inc\left(Z_n, FI_m\right)$$

$$F0REF_{n,m} := p\cdot F0INC_{n,m} + (1-p)\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin\left(FI_m\right)\cdot F0INC_{n,m}\right)$$

Рис. 10. Частина обчислень у системі комп'ютерної алгебри Mathcad

Тоді тепловий потік відбитих фононів позначимо як f0ref(z, fi).

Щоб спростити обчислення, перейдемо від визначеного інтеграла в f0ref(z, fi) до Рімановій сумі. Тоді вираз для відбитого теплового потоку матиме вигляд $F0REF_{n,m}$, де $F0INC_{n,m}$ – це масив значень f0inc(z,fi) у дискретному вигляді. Тут значенням величини M можемо визначати точність обчислень. Усі представлені на рис. 10 обчислення ми позначили умовно як нульовий крок.

Тоді, переходячи до першого кроку, позначимо вираз для теплового потоку падаючих фононів, з урахуванням попереднього відображення від бічної стінки. Отримали такий вираз f1inc(z,fi) на рис. 11.

Step 1

$$f1inc(z,fi) := f0inc(z,fi) + if\left(z - W\cdot\cot(fi) > 0 \wedge z - W\cdot\cot(fi) < L, f0ref(z,fi), 0\right)$$

$$F1INC_{n,m} := F0INC_{n,m} + if\left[Z_n - W\cdot\cot\left(FI_m\right) > 0 \wedge Z_n - W\cdot\cot\left(FI_m\right) < L, F0REF_{floor\left[\frac{\left(Z_n - W\cdot\cot\left(FI_m\right)\right)}{dz}\right], m}, 0\right]$$

$$F1REF_{n,m} := p\cdot F1INC_{n,m} + (1-p)\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin\left(FI_m\right)\cdot F1INC_{n,m}\right)$$

Рис. 11. Опис теплових потоків першої ітерації. Mathcad

Як зазначено у формулі, ми враховуємо тепловий потік, який спочатку падав на певну бічну стінку, а також ту частину фононів, що позначилася на попередньому етапі під певним кутом, під яким вона потрапить на протилежну стінку. Функція if тут виступає як фільтр, який враховує тільки кути, що нас цікавлять.

Перетворюючи на дискретний вигляд, отримаємо вираз $F1INC_{n,m}$. Тоді тепловий потік для відбитих фононів набуде вигляду $F1REF_{n,m}$.

Далі за аналогією з попередніми кроками ми зробили ще три ітерації, описуючи для кожної теплові потоки падаючих та відбитих фононів. Як бачимо на рис. 12 кожен крок включає в себе частину фононів, яка потрапила на певну область бічної стінки без попередніх відображень ($F0INC_{n,m}$), а також частину фононів від попереднього відображення, яка була відбита під певними кутами.

Розраховуючи різні кількості ітерацій, а також ставлячи певні розміри зразка, ми можемо моделювати всілякі випадки для певних нанострічок.

Очевидно, що за умови $p = 0$, тобто коли ймовірність абсолютно дзеркального відображення наближається до нуля, ми переходимо до випадка дифузних відображень, які були розглянуті в розділі 2. Якщо ж ми розглянемо зворотну ситуацію, коли $p = 1$, отримаємо вирази для абсолютно дзеркального відображення, описаного в розділі 3.

$$F2INC_{n,m} := F0INC_{n,m} + \text{if}\left[Z_n - W\cdot\cot(FI_m) > 0 \wedge Z_n - W\cdot\cot(FI_m) < L, F1REF_{\text{floor}\left[\frac{(Z_n - W\cdot\cot(FI_m))}{dz}\right],m}, 0\right]$$

$$F2REF_{n,m} := p\cdot F2INC_{n,m} + (1-p)\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin(FI_m)\cdot F2INC_{n,m}\right)$$

$$F3INC_{n,m} := F0INC_{n,m} + \text{if}\left[Z_n - W\cdot\cot(FI_m) > 0 \wedge Z_n - W\cdot\cot(FI_m) < L, F2REF_{\text{floor}\left[\frac{(Z_n - W\cdot\cot(FI_m))}{dz}\right],m}, 0\right]$$

$$F3REF_{n,m} := p\cdot F3INC_{n,m} + (1-p)\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin(FI_m)\cdot F3INC_{n,m}\right)$$

$$F4INC_{n,m} := F0INC_{n,m} + \text{if}\left[Z_n - W\cdot\cot(FI_m) > 0 \wedge Z_n - W\cdot\cot(FI_m) < L, F3REF_{\text{floor}\left[\frac{(Z_n - W\cdot\cot(FI_m))}{dz}\right],m}, 0\right]$$

$$F4REF_{n,m} := p\cdot F4INC_{n,m} + (1-p)\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin(FI_m)\cdot F4INC_{n,m}\right)$$

Рис. 12. Теплові потоки падаючих та відображених фононів для наступних трьох кроків. Mathcad

4.3. Випадок малої ймовірності абсолютно дзеркального відбиття

Щоб проаналізувати ефективність отриманих виразів, ми склали кілька можливих випадків, для яких змоделювали температурний розподіл всередині зразка. Для цього ми використовували рівняння (40) безрозмірної температури $t(z)$, яке отримали з густини теплового потоку. У цьому випадку ми так само перейшли від визначеного інтеграла до рімановоі суми і отримали наступний вираз для нульового кроку наших обчислень у середовищі Mathcad:

$$GM0_n = \frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin(FL_m)\cdot F0INC_{n,m}\right). \qquad (95)$$

Для першої ітерації аналогічно отримали:

$$GM1_n = \frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{180}\cdot\sum_{m=1}^{M-1}\left(\sin(FL_m)\cdot F1INC_{n,m}\right). \qquad (95)$$

Таким чином, кожна наступна функція буде включати всі попередні.

Дослідимо випадок, коли можливість абсолютно дзеркального відображення мала, тобто p = 0,1. Розглянемо різні співвідношення довжини *L* та ширини *W* зразка.

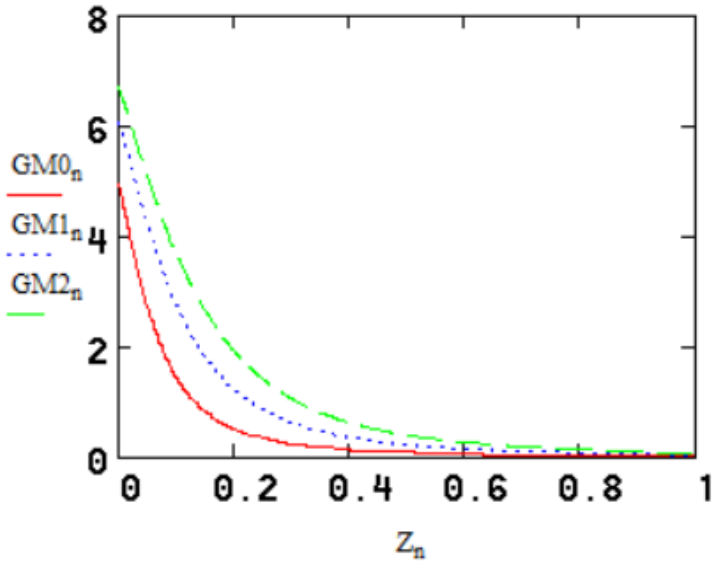


Рис. 13. Температурний розподіл усередині зразка
за умови *W*/*L* = 0.1, p = 0,1

При співвідношенні *W*/*L* = 0.1 для перших трьох відбитків від бічної поверхні спостерігаємо наступний розподіл температури на рис.13.

При подальших обчисленнях ми можемо спостерігати, як графік розподілу температури прагне до лінійного вигляду зі збільшенням кількості відображень від бічних стінок зразка (див. рис. 14).

Отже, зі збільшенням кількості відображень від бічних стінок зразка поступово зменшується внесок теплового потоку при цьому відбитті.

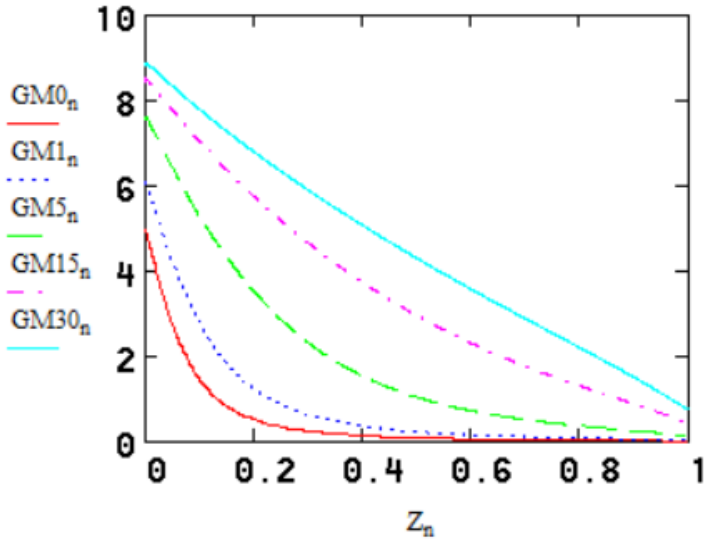


Рис. 14. Температурний розподіл усередині зразка для більшої кількості відображень за умови W/L = 0.1, p = 0,1

Далі розглянемо випадок однакових довжини L та ширини W зразка. У такому разі співвідношення W/L = 1. Прорахувавши для такого виду стрічки тепловий потік, бачимо на рис. 15, що після п'ятого відображення внесок у розподіл температури теплового потоку кожного наступного відображення практично дорівнює нулю.

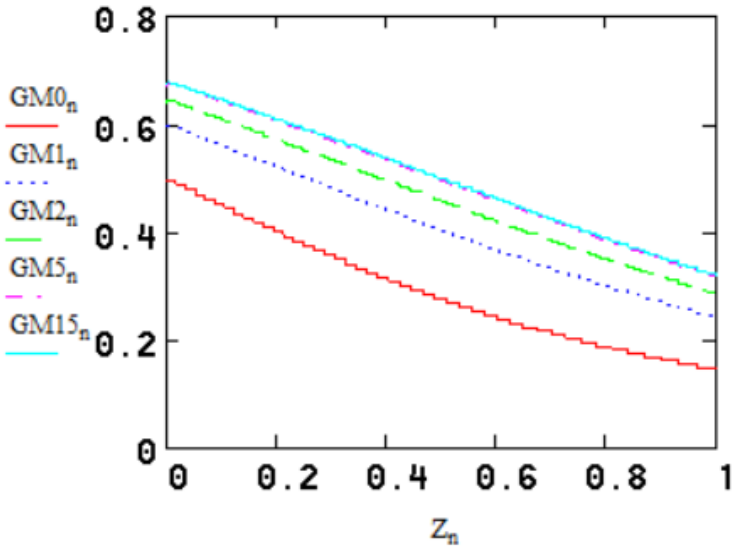


Рис. 15. Температурний розподіл усередині зразка за умови W/L = 1, p = 0,1

Також розглянемо випадок для вузького та довгого зразка. Позначимо відношення довжини та ширини зразка як W/L = 0.01. На рис. 16 бачимо, що при такому співвідношенні для того, щоб розподіл прийшов до лінійного вигляду, нам знадобиться набагато більше відбитків, ніж у двох попередніх випадках.

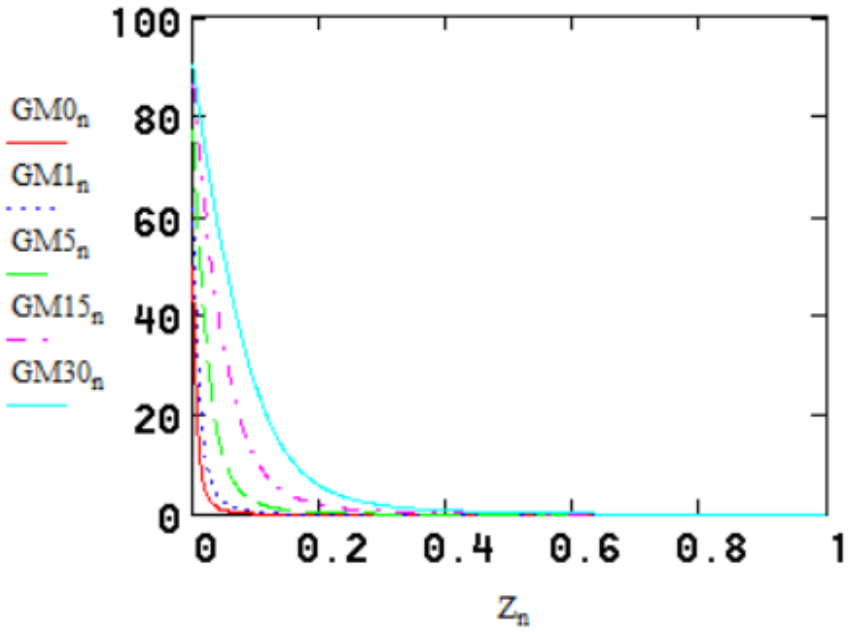


Рис. 16. Температурний розподіл усередині зразка
за умови W/L = 0,01, p = 0,1

Звідси можемо зробити висновок, що чим ближче температурний розподіл усередині зразка до лінійного вигляду, тим менше після кожного наступного відображення залишається фононів у тепловому потоці, що коливається між межами. Також з графіків видно, що кількість можливих відображень потоку фононів від бічних стінок пропорційно до розмірів зразка. Такий випадок близько до випадку дифузного відображення, розглянутого в другому розділі цієї роботи.

4.4. Рівноймовірні дзеркальне та дифузне відображення

Розглянемо тепер випадок, коли абсолютно дзеркальне та дифузне відображення відбуваються з однаковою ймовірністю, тобто коли параметр $p = 0{,}5$. На рис. 17 графік залежності температури для співвідношення довжини та ширини зразка $W/L = 0{,}1$. Можемо спостерігати незначні відмінності з випадком $p = 0{,}1$ для таких розмірів зразка.

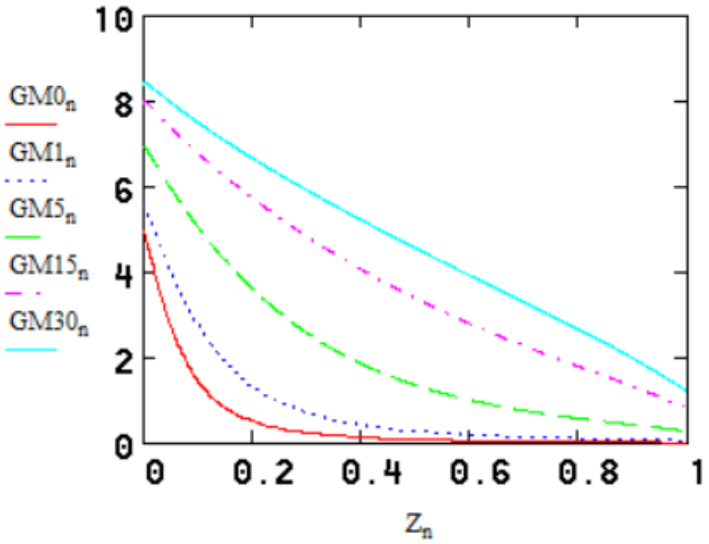


Рис. 17. Температурний розподіл усередині зразка
за умови $W/L = 0{,}1$, p = 0,5

Як і раніше, для нанострічки квадратної форми ми можемо спостерігати (на рис. 18), що графік температурної залежності досить швидко набуває лінійного вигляду, отже, навіть за більшої ймовірності, майже всі фонони відчувають не більше п'яти відбитків від бічної межі.

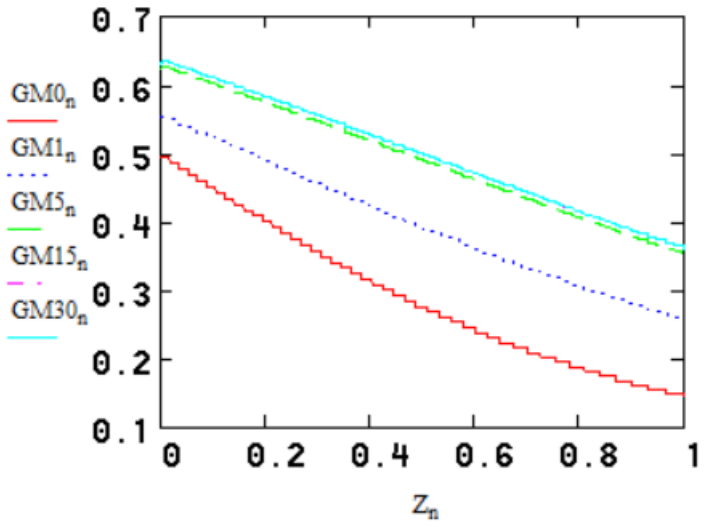


Рис. 18. Температурний розподіл усередині зразка
за умови W/L = 1, p = 0,5

Для довгої та вузької нанострічки ми спостерігаємо незначні зміни (див. рис. 19).

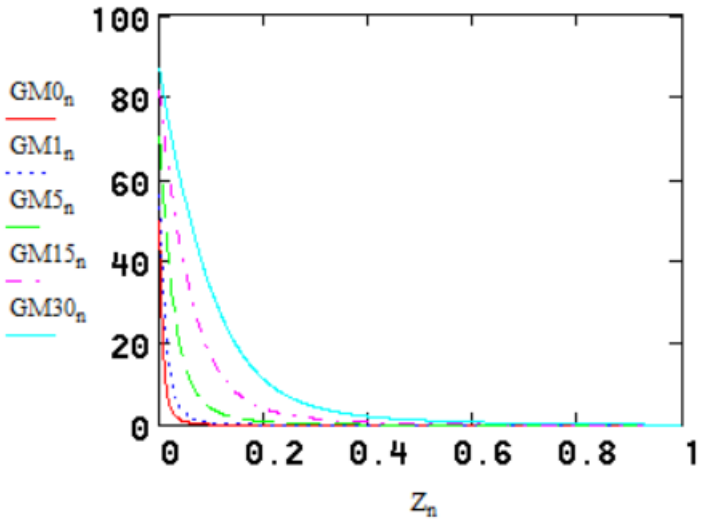


Рис. 19. Температурний розподіл усередині зразка
за умови W/L = 0,01, p = 0,5

З отриманих результатів бачимо, що випадок, коли ймовірності абсолютно дзеркального та дифузного відображення рівні, близький до випадку з великою ймовірністю дифузного відображення.

4.5. Випадок великої ймовірності дзеркального відображення

Далі розглянемо випадок мінімальної ймовірності дифузного відображення, коли більшість фононів відбивається від бічних стінок абсолютно дзеркально. Тоді позначимо параметр p = 0,8.

За умови, що W/L = 0.1 ми отримаємо такі залежності (див. рис. 20). Можемо спостерігати відмінності на початкових відображеннях, але далі температурний розподіл набуває лінійного вигляду так само, як і у двох попередніх випадках.

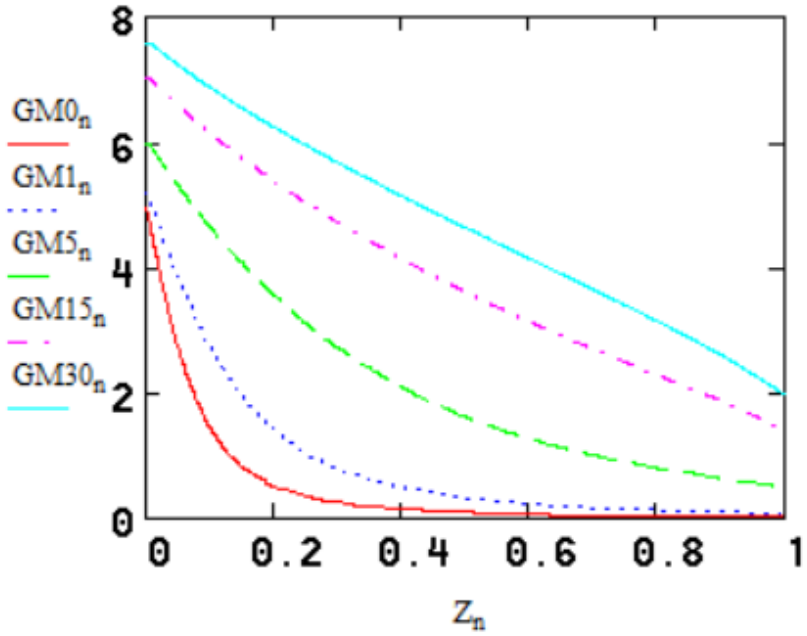


Рис. 20. Температурний розподіл усередині зразка
за умови W/L = 0,1, p = 0,8

Розглянемо тепер випадок нанострічки квадратної форми (див. рис. 21). З отриманих графіків видно, що розподіл приходить до лінійного вигляду швидше, ніж у попередніх випадках, але при цьому кількість відображень, що їх у середньому роблять фонони, збільшилася.

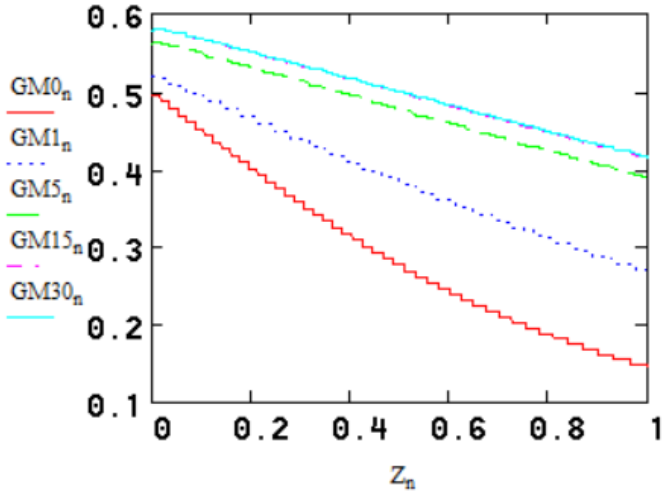


Рис. 21. Температурний розподіл усередині зразка за умови W/L = 1, p = 0,8

У разі вузького та довгого зразка на рис. 22 бачимо невелику відмінність від попередніх випадків. Так само можна припустити, що розподіл температури швидше прийде до лінійного вигляду, а кількість відображень, що здійснюються фононним потоком, збільшиться.

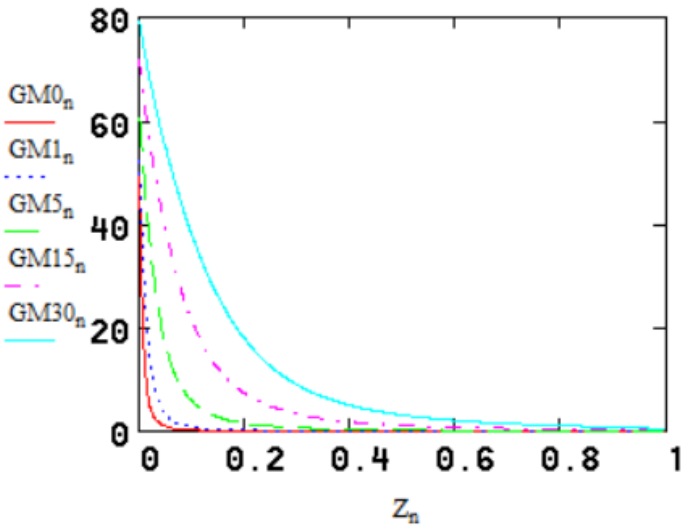


Рис. 22. Температурний розподіл усередині зразка за умови W/L = 0,01, p = 0,8

При даному значенні ймовірності дзеркального відбиття p наша модель наближається до граничного випадку абсолютно дзеркальних відображень, який було розглянуто у третьому розділі цієї роботи.

ВИСНОВКИ

У дипломі досліджено фізичні механізми розсіювання фононів на границях зразка в двовимірному випадку та їх вплив на теплопровідність зразка. Запропоновано аналітичну модель теплопровідності двовимірного фононного газу в двовимірних зразках кінцевих розмірів.

В результаті виконання дипломної роботи було досягнуто основну мету роботи, а саме розгляд фізичних механізмів, що забезпечують перехід від дзеркальних граничних умов до повністю дифузійних. Зокрема, запропоновано модель для ефективного урахування шорсткості для граничних випадків слабкого та абсолютного дифузного розсіювання та проведено порівняння з існуючими моделями.

У дипломі досліджено стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, що забезпечується лише взаємодією фононів з бічними межами зразків. В результаті розв’язання задачі отримано систему інтегральних рівнянь для функцій розподілу фононів, що падають та випромінюються боковими границями. Цю систему можна розв’язати як ітераційним методом, так і наближено аналітично. Отримані рішення описують баланс теплових потоків, розподіл температури у зразку та залежність ефективного коефіцієнта теплопровідності від розміру зразка. Запропоновані методи урахування послідовних фононних взаємодії з границями з довільними рівнями шорсткості дозволяють визначити умови застосовності для існуючих моделей теплопровідності двовимірних зразків кінцевих розмірів.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. A. A. Balandin, Nat. Mater. 10, 569 (2011).
2. D. L. Nika, A. S. Askerov, A. A. Balandin Nano Lett. 12, 6, 3238 (2012).
3. A.Tavakoli, Ch. Blanc, H. Ftouni, K.J. Lulla, A. D. Fefferman, E. Collin, and O. Bourgeois, Phys. Rev. B 95, 165411 (2017).
4. M. Asheghia, K. Kurabayashi, R. Kasnavi, K. E. Goodson, J. of Appl. Phys., 91, 5079 (2002).
5. E. A. Jackson, A. D. Mistriotis, J.Phys.: Condens. Matter., 1,1223 (1989).
6. H.B.G. Casimir, Physica V, 6 (1938).
7. J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Clarendon Press, Oxford, (2001).
8. T. Klitsner, J.E. VanCleve, H.E. Fischer, and R.O. Pohl, Phys. Rev. B 38, 7576 (1988).
9. D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier, Phys. Rev. B 72, 064305 (2005).
10. S. Ramiere, S. Volz, and J. Amrit, J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 115306 (2016).
11. M. Perlmutter and R. Siegel, J. Heat Transfer, 85C, 55 (1963).
12. S. Mei, L. N. Maurer, Z. Aksamija, and I. Knezevic, J. Appl. Phys., 116, 2014 , 164307.
13. H. J. Maris, Sh.I. Tamura, Phys.Rev. B 85, 054304 (2012).
14. H.B.G. Casimir, Physica V, 6 (1938).
15. J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Clarendon Press, Oxford, 2001).
16. J. Amrit, K. Nemchenko, T. Vikhtinskaya Journal of Applied Physics, 129 (2021) 085105.