МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ
Кафедра комп'ютерної фізики

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до кваліфікаційної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Вплив граничного відбиття та розміру на перенесення тепла в циліндричних провідниках»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64
Дегтяр Н.С.
Спеціальність: 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»
Освітньо-наукова програма: «Комп'ютерна фізика»
Керівник: Геращенко Н. О.
Рецензент: _____

Харків – 2025

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
_____ Костянтин НЄМЧЕНКО
підпис
"____"_____2025 року

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Дегтярю Нікіті Сергійовичу

1. Тема роботи «Вплив розмірів та граничного відбиття на перенесення тепла в циліндричних провідниках» керівник роботи: Геращенко Надія Олексіївна, асистент кафедри, науковий консультант: Нємченко К. Е., професор. Затверджено наказом по університету від 20 січня 2025 року № 4201-5/147.

2. Строк подання студентом роботи 19.05.2025

3. Перелік питань, які потрібно вирішити:

1) зробити огляд літератури, аналітичних та комп'ютерних методів визначення ефективності перенесення тепла в провідниках циліндричної форми в залежності від розмірів та ступені шорсткості поверхні;

2) сформулювати та узагальнити основні фізичні підходи до опису теплопереносу в нанорозмірних структурах, включаючи вплив геометрії провідників та властивостей їх поверхонь.

3) запропонувати нові або модифіковані аналітичні та чисельні методи для розв’язання прикладних задач моделювання перенесення тепла в наноструктурах у системах з реальною шорсткістю поверхні.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Проведення огляду літератури щодо перенесення тепла в провідниках
2	Ознайомлення з аналітичними методами визначення параметрів провідників циліндричної форми для ефективного перенесення тепла
3	Розробка комп’ютерних методів розрахунків потоків тепла в залежності від розмірів провідників та ступені шорсткості поверхні;
4	Формулювання та узагальнення основних фізичних підходів до опису теплопереносу в нанорозмірних структурах
5	Узагальнення методів підвищення ефективності перенесення тепла включаючи вплив геометрії провідників та властивостей їх поверхонь.
6	Втілення модифікованих методів розв’язання прикладних задач моделювання перенесення тепла
7	Розробка та використання нових методів визначення параметрів перенесення тепла в наноструктурах у системах з реальною шорсткістю поверхні.
8	Формулювання висновків та формування списку цитованої літератури

5. Дата видачі завдання 15 січня 2025 року.

Студент _____ Нікіта ДЕГТЯР
підпис

Керівник роботи _____ Надія ГЕРАЩЕНКО
підпис

РЕФЕРАТ

Дегтяр Нікіта «Вплив розмірів та граничного відбиття на перенесення тепла в циліндричних провідниках»
Кваліфікаційна робота магістра з комп'ютерної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н. Каразіна, 2025. – 56 с.

У цій роботі досліджуються теплові властивості циліндричних діелектричних провідників у балістичному режимі перенесення фононів. Такий режим є характерним для низьковимірних наноструктур, а також твердих тіл за умов низьких температур або малих розмірів, коли міжфононною взаємодією можна знехтувати. У цьому випадку тепловий опір провідника визначається геометрією системи та відбивними властивостями бічних стінок.

Особливу увагу у роботі приділено вивченню теплових потоків та температурних профілів у циліндричних провідниках за умов конкуренції дифузного розсіювання фононів на межах — коли фонон, що падає на поверхню, відбивається з рівноймовірним розподілом у всіх напрямках, та дзеркального розсіювання. Тобто, у роботі враховано різні механізми розсіювання на межі — від ідеально дзеркального до повністю дифузного — з метою більш точної моделі теплопереносу.

Окремо розглянуто узагальнення рівнянь для теплових потоків балістичних частинок у циліндричних трубках скінченної довжини за умов повної акомодації на стінках, а також порівняння з класичними моделями теплопереносу у стрижневих діелектричних провідниках.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ШОРСТКІСТЬ ПОВЕРХНІ, ФОНОНИ, ДІФУЗНЕ ВІДБИТТЯ, ДЗЕРКАЛЬНЕ ВІДБИТТЯ, КОЕФІЦІЄНТ ДЗЕРКАЛЬНОСТІ, НАНОПРОВІДНИКИ, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ

ABSTRACT

Degtyar Nikita “The influence of size and boundary reflection on heat transfer in cylindrical conductors”

Master’s thesis in computer physics. – Kh.: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – 56 p.

This work investigates the thermal properties of cylindrical dielectric conductors in the ballistic phonon transfer regime. This regime is characteristic of low-dimensional nanostructures, as well as solids at low temperatures or small sizes, when interphonon interaction can be neglected. In this case, the thermal resistance of the conductor is determined by the geometry of the system and the reflective properties of the side walls.

Particular attention is paid to the study of heat fluxes and temperature profiles in cylindrical conductors under conditions of competition between diffuse phonon scattering at the boundaries — when a phonon incident on the surface is reflected with an equal probability distribution in all directions — and specular scattering. That is, the work takes into account different mechanisms of scattering at the boundary — from perfectly specular to completely diffuse — in order to obtain a more accurate heat transfer model.

Moreover, the generalization of equations for heat fluxes of ballistic particles in cylindrical tubes of finite length under conditions of complete accommodation on the walls, as well as a comparison with classical models of heat transfer in rod dielectric conductors, is considered.

KEYWORDS: SURFACE ROUGHNESS, PHONONS, DIFFUSE REFLECTION, SPECIFIC REFLECTION, REFLECTION COEFFICIENT, NANOCONDUCTORS, THERMAL CONDUCTIVITY

ЗМІСТ

ВСТУП 7
РОЗДІЛ 1. ТЕПЛОВИЙ ТРАНСПОРТ У НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУРАХ ТА ПРИСТРОЯХ 10
1.1. Вступ до розділу 10
1.2. Фізика фононного транспорту 10
РОЗДІЛ 2. ЗАСТОСУВАННЯ В ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ ТА ЕЛЕКТРОНІЦІ 25
2.1. Зберігання даних 25
2.3. Композитні підкладки для силової електроніки 30
РОЗДІЛ 3. ТЕПЛООБМІН У ПРОВІДНИКАХ ЦИЛІНДРИЧНОГО ПЕРЕРІЗУ З ДИФУЗІЙНИМ ГРАНИЧНИМ РОЗСІЮВАННЯМ 32
3.1. Вступ до роділу 32
3.2. Складання інтегрального рівняння та його розв’язання 33
3.3. Тепловий потік у циліндричному провіднику 40
3.4. Обговорення дифузного розсіювання 42
3.5. Вплив граничного відбиття та розміру на перенесення тепла в циліндричних провідниках 43
3.6. Результати чисельних розрахунків 48
3.7.Висновки до розділу 51
ВИСНОВКИ 52
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 53

ВСТУП

Актуальність теми. У сучасній фізиці конденсованого стану та нанотехнологіях дедалі більшу увагу привертає дослідження теплових процесів у наноструктурах, зокрема в умовах, коли звичні класичні уявлення про теплопровідність потребують суттєвого перегляду. При зменшенні розмірів матеріалів до нанометрових масштабів або при охолодженні систем до наднизьких температур виникають умови, за яких фонони — квазичастинки, що переносять тепло у діелектриках — втрачають здатність до ефективної взаємодії між собою. У таких випадках реалізується балістичний режим перенесення тепла, де теплопровідність більше не визначається внутрішнім фонон-фононним розсіюванням, а залежить від геометрії зразка та характеру розсіювання фононів на межах.

Циліндричні провідники є важливим класом систем, що набули значного інтересу як у теоретичних, так і в експериментальних дослідженнях. З одного боку, вони моделюють волоконні елементи, що застосовуються у сучасних сенсорах, наноустройствах та в системах теплового менеджменту. З іншого боку, їхня симетрія дозволяє провести глибокий аналітичний аналіз теплопереносу у балістичному режимі. У реальних умовах на розсіювання фононів значно впливають мікрошорсткість, матеріальні властивості поверхні, ступінь акомодації та тип граничного відбиття — від ідеально дзеркального до повністю дифузного. Ігнорування цих ефектів може призвести до некоректного опису теплових характеристик наноструктур.

Отже, розробка і дослідження моделей, що точно враховують вплив геометрії, розмірів та граничних умов на перенесення тепла в циліндричних діелектричних провідниках, є актуальною як з фундаментальної, так і з прикладної точки зору. Результати таких досліджень важливі для інженерії нових матеріалів, мікро- та нанопристроїв, а також для розуміння граничних режимів теплопровідності, які виникають на перетині класичної та квантової фізики.

Основною метою дипломної роботи є побудова та аналіз математичної моделі теплоперенесення у циліндричних діелектричних провідниках у балістичному режимі з урахуванням впливу геометричних розмірів та типу граничного розсіювання фононів на бокових поверхнях. Робота спрямована на дослідження температурних профілів, теплових потоків і залежності ефективної теплопровідності від ступеня дзеркальності відбиття, а також на порівняння з класичними дифузійними моделями для провідників скінченної довжини.

Об’єкт дослідження – перенесення тепла у мікроскопічних структурах

Предмет дослідження – процеси перенесення тепла у циліндричних діелектричних провідниках у балістичному режимі, зокрема вплив геометричних параметрів та характеру граничного відбиття фононів на теплові потоки та ефективну теплопровідність системи.

Методи дослідження – аналітичне моделювання, чисельне розв’язання інтегральних рівнянь для функцій фононного розподілу, метод послідовних наближень, а також порівняльний аналіз отриманих результатів із класичними підходами до опису теплоперенесення.

Наукова новизна одержаних результатів – полягає у розробці узагальненої моделі теплоперенесення у циліндричних діелектричних провідниках у балістичному режимі з урахуванням довільного співвідношення між дзеркальним та дифузним розсіюванням фононів на бокових стінках. Вперше запропоновано чисельну реалізацію методу, який дозволяє ефективно обчислювати теплові потоки при різних довжинах провідника, включно з великими значеннями довжини, що раніше було обмежено повільною збіжністю ітераційних методів. Також проведено аналіз впливу ступеня шорсткості межі на температурні профілі та ефективну теплопровідність.

Практичне значення отриманих результатів:

1. Оптимізація тепловідведення в наноструктурах – отримані результати дозволяють точніше моделювати та проєктувати ефективні теплові шляхи в мікро- та наноелектроніці, де розміри провідників порівнянні з довжиною вільного пробігу фононів.

2. Врахування шорсткості поверхні в інженерних розрахунках – побудована модель враховує реальний характер відбиття фононів (від повністю дзеркального до дифузного), що дозволяє інженерам враховувати шорсткість при проєктуванні теплопровідних елементів.

3. Покращення точності при моделюванні теплопереносу – використання узагальнених інтегральних рівнянь та вдосконаленого чисельного методу забезпечує точніший розрахунок теплових потоків у циліндричних провідниках довільної довжини.

4. Застосування в аналізі низькотемпературних експериментів – результати можуть бути використані для інтерпретації експериментальних даних з дослідження теплопровідності в умовах, де проявляється балістичний режим перенесення.

5. Розширення можливостей CAD/CAE-систем – модель може бути інтегрована в комп’ютерні пакети моделювання (наприклад, COMSOL, ANSYS), що дозволить враховувати мікроскопічні ефекти при аналізі теплових процесів у складних геометріях.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 56 сторінок, із них основного тексту 46 сторінок, 9 рисунків за текстом, список використаних джерел із 43 найменувань на 4 сторінках.

РОЗДІЛ 1. ТЕПЛОВИЙ ТРАНСПОРТ У НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУРАХ ТА ПРИСТРОЯХ

1.1. Вступ до розділу

Зі зменшенням розмірів фізичних систем до наномасштабів змінюються не лише їхні електричні, але й теплові властивості. У наноструктурах тепловий транспорт часто виходить за межі класичного опису на основі рівняння теплопровідності Фур'є, і проявляються квантові та балістичні ефекти. У таких умовах тепло переноситься не безперервно, а через дискретні квазичастинки — фонони, для яких характерна довжина вільного пробігу може бути співрозмірною з розмірами системи. Це призводить до значного впливу геометрії провідника та властивостей його меж на загальний тепловий опір. Дослідження механізмів теплопереносу в нанорозмірних структурах є ключовим для розробки високоефективних термоелектричних матеріалів, мікроелектроніки нового покоління та пристроїв з низьким енергоспоживанням. У цьому розділі розглядаються сучасні підходи до моделювання теплового транспорту в нанопровідниках, наноплівках і нанотрубках, а також вплив граничних умов і розсіювання фононів на ефективність тепловідведення.

1.2. Фізика фононного транспорту

У цьому підрозділі ми даємо короткий огляд основ поширення та розсіювання фононів. Розуміння цих двох тем має важливе значення для розробки теорії теплового потоку в невеликій конструкції.

Щоб розвинути кількісне розуміння теплового потоку в невеликій структурі, на даний момент існують два досить різні підходи. Перший — використовувати певну версію молекулярної динаміки [1]. Це включає, як перший крок, побудову моделі для міжатомного потенціалу; це може базуватися на підгонці до виміряних величин, таких як співвідношення

дисперсії фононів, або воно може бути розраховане з перших принципів. Міжатомний потенціал має включати члени принаймні до третього порядку в атомних зміщеннях, щоб можна було правильно змоделювати ангармонічні фонон-фононні взаємодії. Для розрахунку теплового потоку можна використовувати різні методи. Найпростішим є підключення кожного кінця наноструктури до нагрівальних ванн з різними температурами, а потім обчислення стаціонарного потоку тепла від однієї ванни до іншої. Як альтернативу, можна розрахувати флуктуаційні теплові струми в конструкції та пов'язати їх із теплопровідністю за допомогою певної форми теореми про флуктуації-розсіювання.

Як інструмент для обчислення теплового потоку молекулярна динаміка має два обмеження [2 – 5]. Перша проблема полягає в тому, що для деяких наноструктур кількість атомів, які необхідно включити в моделювання, може бути досить великою. Як приклад, припустимо, що потрібно обчислити, як теплопровідність нанодроту змінюється залежно від діаметра в діапазоні діаметрів, де відбувається перехід від балістичного поширення до дифузійного. Якщо середня довжина вільного пробігу фонона становить 50 нм, необхідно розглядати дроти діаметром щонайменше 100 нм і довжину цих дротів, можливо, 200 нм. У такому обсязі вони становлять близько 100 мільйонів атомів, що робить моделювання складним. Друга проблема – розрахунок класичний. Як наслідок, під час моделювання середня енергія кожної фононної моди дорівнює $k_B T$, тоді як правильний розподіл енергії задається розподілом Планка. Для мод із такою частотою, що $\hbar\omega < k_B T$похибка мала, але похибка стає великою для будь-якого твердого тіла, у якому фононний спектр розширюється до таких частот, що $\hbar\omega > k_B T$. Важко оцінити вплив цієї помилки. Той факт, що моделювання завищує питому теплоємність, призведе до завищеної оцінки провідності. Але також вірно, що помилка в середній енергії високочастотних мод призведе до переоцінки швидкості фононфононного розсіювання; це призводить до недооцінки теплового потоку. Для таких матеріалів, як кремній з

температурою Дебая 600 К, помилка може бути не надто великою для моделювання при кімнатній температурі, але для таких матеріалів, як алмаз ($\Theta_D \sim 2000$ К), вуглецеві нанотрубки та графен, більшість фононних мод мають таку високу частоту, що вони погано описуються класичною механікою.

Молекулярна динаміка була використана для успішного моделювання теплового потоку через межі розділу і теплового потоку в надгратках. Для цих застосувань метод має велику перевагу, оскільки легко включити в модель різні аспекти мікроскопічної структури межі розділу, такі як шорсткість і змішування.

Другий підхід базується на фононному рівнянні Больцмана [6]

$$\frac{\partial n(\overrightarrow{kj})}{\partial t} = \left.\frac{\partial n(\overrightarrow{kj})}{\partial t}\right|_{coll} - \vec{v}(\overrightarrow{kj}).\nabla n\left(\overrightarrow{kj}\right) \qquad (1)$$

де $\partial n(\overrightarrow{kj})/\partial t|_{\text{coll}}$ – швидкість, з якою розподіл фононів $n(\overrightarrow{kj})$змінюється внаслідок зіткнень, $\vec{k}$ – хвильовий вектор, j – індекс, що вказує на поляризацію, і $\vec{v}\left(\overrightarrow{kj}\right)$– групова швидкість. Оскільки нас головним чином цікавить тепловий потік в результаті малих і постійних градієнтів температури (градієнтів, при яких температура змінюється на невелику величину на відстані одного середнього вільного пробігу фонона та на відстані, що дорівнює поперечним розмірам зразка), ми можемо використовувати незалежну від часу та лінеаризовану версію цього рівняння

$$\frac{\hbar\omega(\overrightarrow{kj})}{k_B T^2}\bar{n}(\overrightarrow{kj})(\bar{n}(\overrightarrow{kj})+1)\vec{v}(\overrightarrow{kj})\cdot\nabla T = \left.\frac{\partial n(\overrightarrow{kj})}{\partial t}\right|_{\text{coll}} \qquad (2)$$

де $\bar{n}(\overrightarrow{kj})$– рівноважне число фононів хвильового вектора $\overrightarrow{k}$ та частоти поляризації jпри температурі T. Це рівняння має бути доповнено відповідними граничними умовами на поверхні зразка. Ці умови відповідають дифузному розсіюванню або дзеркальному розсіюванню тощо.

Щоб розв'язати рівняння Больцмана [7], необхідно знати співвідношення дисперсії фононів, групову швидкість і швидкість, з якою відбуваються зіткнення. Співвідношення дисперсії фононів відоме з розсіювання нейтронів для більшості цікавих матеріалів. Частоти в особливих точках зони Бріллюена можна виміряти за допомогою розсіювання світла. Останнім часом непружне розсіювання рентгенівського випромінювання також стало корисним для вимірювання фононних частот. Це має важливу перевагу в тому, що рентгенівське випромінювання від синхротронного джерела може бути сфокусоване в дуже малий об'єм, таким чином дозволяючи використовувати невеликі зразки. Групову швидкість фононів можна отримати з дисперсійного співвідношення:

$$\vec{v}\left(\overrightarrow{kj}\right) = \frac{\partial\omega\left(\overrightarrow{kj}\right)}{\partial\vec{k}} \tag{3}$$

Зміна групової швидкості з хвильовим вектором складна; існують напрямки фокусування, в яких групова швидкість є стаціонарною щодо варіацій, $\vec{k}$і тому існує велика кількість фононів, які поширюються майже в одному напрямку. Але оцінити термін зіткнення набагато складніше. Важливо зазначити, що для побудови члена зіткнення рівняння Больцмана недостатньо обчислити лише час життя $\tau(\overrightarrow{kj})$кожного фонона $\overrightarrow{kj}$. Зіткнення фонона $\overrightarrow{kj}$з іншим фононом неминуче руйнує не тільки фонон, $\overrightarrow{kj}$але й інший фонон. Крім того, утворюється новий фонон. Таким чином, потрібно знати не тільки час життя, але й ядро зіткнень, Cвизначене таким чином

$$\left.\frac{\partial n(\overrightarrow{kj})}{\partial t}\right|_{\text{coll}} = -\frac{n(\overrightarrow{kj})}{\tau(\overrightarrow{kj})} + \sum_{k'j'} C\left(\vec{k}j;\vec{k}'j'\right)n\left(\vec{k}'j'\right)d^3\vec{k}' \tag{4}$$

Ядро не є симетричним відносно обміну $\overrightarrow{kj}$з $\vec{k}'j'$; замість цього можна показати, що

$$C\left(\vec{k}'j';\overrightarrow{kj}\right) = C\left(\overrightarrow{kj};\vec{k}'j'\right)\frac{n\left(\vec{k}'j'\right)\left[n\left(\vec{k}'j'\right)+1\right]}{n(\overrightarrow{kj})[n(\overrightarrow{kj})+1]} \quad (5)$$

Розрахунок швидкості ангармонійних процесів передбачає наступні етапи:

1. Необхідно побудувати модель для гармонійної частини міжатомного потенціалу. Це можна зробити, використовуючи теорію перших принципів або простіше, вибравши модель для міжатомних сил, яка дає достатньо хорошу згоду з виміряним співвідношенням дисперсії.

2. Тоді потрібна модель для ангармонічної частини потенціалу. З метою обчислення трифононних процесів, це повинно містити члени, які є кубічними в атомних зміщеннях. Знову ж таки, цю частину потенціалу можна отримати з перших принципів або шляхом вибору моделі, яка відповідає експериментально виміряним параметрам. Ці параметри можуть включати, наприклад, константи пружності третього порядку (точно відомі для багатьох матеріалів), а також коефіцієнт теплового розширення та його зміну з температурою. Крім того, для багатьох матеріалів існують експериментальні значення для зміни частоти оптичних фононів центру зони з прикладеною пружною деформацією.

3. З цих двох моделей можна розрахувати елементи матриці та швидкість трифононного розсіювання. Ці матричні елементи включають не тільки ангармонійний потенціал і фононні хвильові вектори, але й вектори поляризації взаємодіючих фононів. Обчислення елементів матриці та ядра зіткнень Cє простим, але складним. Оскільки Cвін включає вектори поляризації (величини, які не підлягають безпосередньому вимірюванню), оцінити точність розрахунку нелегко. Загальна формула для часу життя фононів наведена в класичній статті Марадудіна і Фейна. Фонон $\vec{k}_1 j_1$може розсіюватися фононом, $\vec{k}_2 j_2$утворюючи інший фонон $\vec{k}_3 j_3$. У цьому процесі енергія та імпульс кристала зберігаються так, що

$$\hbar\omega(\vec{k}_1 j_1) + \hbar\omega(\vec{k}_2 j_2) = \hbar\omega(\vec{k}_3 j_3) \quad (6)$$

де $\vec{G}$– вектор зворотної решітки. Фонон $\vec{k}_1 j_1$також може розпадатися на фонони $\vec{k}_2 j_2$і $\vec{k}_3 j_3$в цьому випадку

$$\hbar\omega(\vec{k}_1 j_1) = \hbar\omega(\vec{k}_2 j_2) + \hbar\omega(\vec{k}_3 j_3) \quad (7)$$

Процеси, у яких, $\vec{G} = 0$називаються звичайними (N) процесами, а ті, для яких $\vec{G} \neq 0$– процесами Umklapp (U). Процеси перекидання мають особливе значення, оскільки ці зіткнення безпосередньо зменшують тепловий потік. Рання робота над часом життя фононів була підсумована в оглядових статтях Клеменса та Каррутерса, а також у книзі Зімана. Значна частина цієї роботи була зосереджена на визначенні наближених виразів для часу життя фононів у межах низької або високої частоти, або коли температура була набагато нижчою або вищою за температуру Дебая.

Деякі важливі результати [8]:

1. Коли температура дорівнює нулю, час життя фононів завжди обмежений граничним розсіюванням. Він також обмежений процесом спонтанного ангармонійного розпаду, який керується законами збереження (рівняння (6) і (7)). Для поздовжніх і швидких поперечних акустичних фононів швидкість τ^{-1}цього процесу змінюється, оскільки ω^5;припускається, що хвильове число мале порівняно з хвильовим числом на межі зони Бріллюена. Груба оцінка величини цієї швидкості для ряду кристалів, а більш детальні розрахунки були виконані Tamura та Berke et al. Для повільних поперечних фононів швидкість змінюється, як ω^5коли хвильовий вектор лежить в одних напрямках, але в інших напрямках швидкість розпаду дорівнює нулю, оскільки немає розв'язку умов збереження енергії та імпульсу.

2. Обговорення часу життя оптичних фононів при нульовій температурі було дано Клеменсом.

3. Для температур, набагато менших за температуру Дебая Θ_Dі за умови, що ωвони набагато менші за частоту Дебая, фонони мають довжину

хвилі, яка набагато більша за параметр решітки. Тоді розрахунок часу життя фононів спрощується, оскільки ангармонічний зв'язок можна виразити через пружні константи третього порядку. Ці константи були виміряні для багатьох кристалів, що представляють технічний інтерес. Тривалість життя фононів змінюється залежно від частоти ωта температури Tвідповідно до закону

$$\tau^{-1} \propto T^5 f(\hbar\omega/k_B T) \tag{8}$$

Для поперечних фононів з $\omega \ll k_B T/\hbar, \tau^{-1}$пропорційно ωT^4. Герінг [190]показав, що для поздовжніх фононів знову з $\omega \ll k_B T/\hbar, \tau^{-1} \propto \omega^a T^{5-a}$, де aє цілим числом, яке більше 1 і залежить від симетрії кристала. Час життя визначається зіткненнями поздовжнього фонона з поперечним фононом і утворенням поперечного фонона різної поляризації. Ці зіткнення називають процесами Херрінга. Для кубічних кристалів зворотний час життя можна розрахувати в закритій формі як

$$\tau^{-1} = \frac{3\xi(3)hk^2}{4\pi^2\rho^2 c_T^5}\left(\frac{k_B T}{h}\right)^3 \frac{C_{11}+C_{12}}{C_{11}+2C_{12}+C_{44}} \frac{1}{|C_{11}-C_{12}-2C_{44}|} \times \{(1-3G)C_1^2[E(R)-(1-R)K(R)]$$

де $\xi(3)$– дзета-функція Рімана, C_{ij}– пружні константи другого порядку, c_T– швидкість звуку поперечних хвиль у напрямку (100), а C_1і C_2пов'язані з пружними константами другого та третього порядку формулою

$$C_1 = C_{155} - C_{144} + 2C_{44}, C_2 = C_{456} + C_{44}. \tag{9}$$

$K(R)$і $E(R)$є повними еліптичними інтегралами першого і другого роду з

$$R = (C_{11}-C_{44})(C_{11}+2C_{12}+C_{44})/(C_{11}+C_{12})^2 \tag{10}$$

і $G = l^2m^2 + m^2n^2 + n^2l^2$де l, m, nнапрямні косинуси $\vec{k}$. 4. Для температур, вищих за Θ_Dзворотний, час життя для всіх фононів пропорційний температурі. Цей результат справедливий за умови, що трифононні процеси є найважливішими; при досить високих температурах

(наприклад, поблизу точки плавлення) може бути значний внесок отирифононних процесів.

5. На додаток до цих загальних результатів було розраховано час життя фононів для моделі центральних сил найближчого сусіда ГЦК кристала з одним атомом на елементарну комірку. Ця модель має ту перевагу, що кожна з гармонійних і ангармонійних сил описується лише одним параметром. Ці параметри можна пов'язати з температурою Дебая та постійною Грюнайзена γ. Тривалість життя фононів на основі цієї моделі була вперше розглянута Марадудіном та ін., а пізніше досліджена більш детально. Обернений час життя можна виразити як

$$\frac{1}{\tau(\overrightarrow{kj})} = \frac{\hbar\gamma^2\rho^{2/3}}{M^{5/3}} G_{\text{total}}\,, \tag{11}$$

де ρ– густина маси, M– маса кожного атома, G_{total} – безрозмірна функція хвильового вектора, температури та поляризації фононів. Як приклад отриманих результатів на рис. 1 показано G_{total} поздовжні фонони, що поширюються вздовж напрямку для п’яти різних значень хвильового числа. У низькій температурній межі, такій $\hbar\omega \gg k_B T$, що обернений час життя визначається спонтанним квантовим розпадом; якщо частота набагато менша за частоту Дебая, але все ще задовольняє $\hbar\omega \gg k_B T$, швидкість пропорційна ω^5. При високих температурах швидкість розпаду пропорційна температурі і монотонно зростає зі збільшенням хвильового числа. Результати на рис. 1 є сумарними, тобто вони включають як Umklapp, так і нормальні процеси. Виявляється, частка f_U подій розсіювання, які є U-процесами, змінюється з хвильовим числом напрочуд складним чином . На межі зони ($k = k_{\max}$)немає різниці між U та N-процесами, отже $f_U = 0.5$. U-процеси можуть відбуватися, коли $k = 0.8k_{\max}$або $0.2k_{\max}$, але між цими значеннями існує діапазон, kу якому U-процеси не відбуваються. Через ці складнощі важко судити про достовірність розрахунків, заснованих на дуже спрощених виразах для часу життя фононів, таких як результат Клеменса. Звичайно, ця

формула не узгоджується з точними результатами для ГЦК кристала, показаного на рис. 1. Здається ймовірним Здається ймовірним, що протягом наступних кількох років, у міру збільшення кількості розрахунків із перших принципів на основі рівняння Больцмана [9], ми краще зрозуміємо корисність наближених формул.

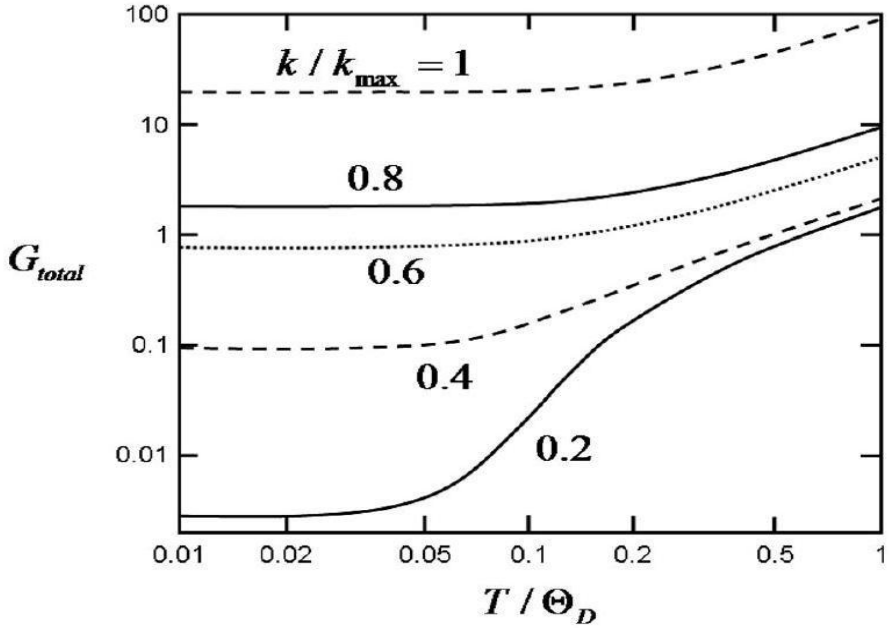


Рис.1. Розраховане значення параметра, G_{total} що визначає час життя поздовжніх фононів, що поширюються в напрямку [100], як функцію температури. Ці результати для спрощеної моделі ГЦК кристала. $k_{\max}$– фононне хвильове число на межі зони.

6. Важливо відзначити, що всі обговорені результати неявно припускають, що нас цікавить час життя фонона з ωтакою частотою, що $\omega\bar{\tau} \gg 1$, де $\bar{\tau}$середній час життя теплових фононів. Щоб зрозуміти це, спочатку зауважте, що для дуже низькочастотного фонону час життя визначається зіткненнями з тепловими фононами (див. рівняння (12)); процеси розпаду (рівняння (7)) незначні. Скінченний час життя фононів $\vec{k}_2 j_2$і $\vec{k}_3 j_3$робить їхню енергію невизначеною на величини $\hbar/\tau(\vec{k}_2 j_2)$і $\hbar/\tau(\vec{k}_3 j_3)$відповідно. Якщо енергетична невизначеність порівнянна або більша за енергію фонона, $\vec{k}_1 j_1$закони збереження порушуються.

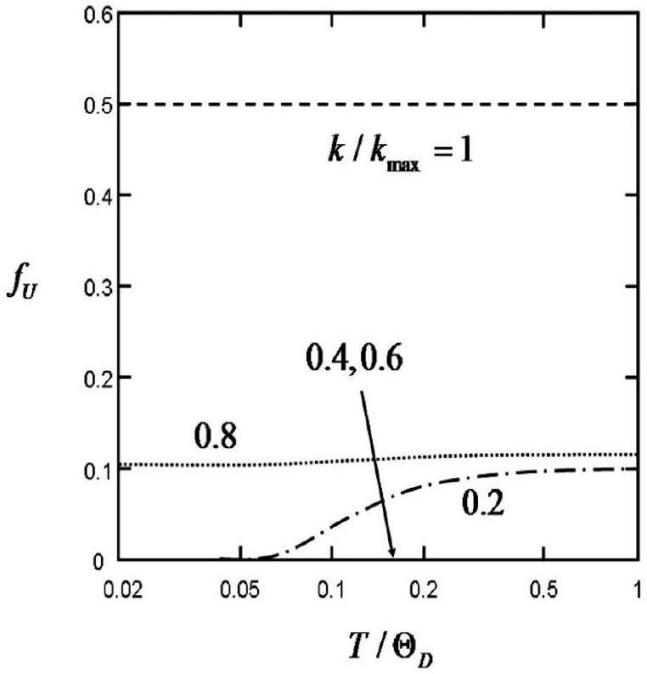


Рис. 2. Розрахована частка f_U фононних взаємодій, які є U-процесами, як функція температури. Результати наведено для поздовжніх фононів, що поширюються в напрямку [100]. Ці результати для спрощеної моделі ГЦК кристала. $k_{\max}$– фононне хвильове число на межі зони.

Можна показати, що за цих умов обернений час життя змінюється як $\tau^{-1} \propto \omega^2\bar{\tau}$; це називається режимом Ахіезера. У цьому режимі можна вважати, що зворотний час життя τ^{-1}є сумою двох процесів, обидва з яких можна розглядати в макроскопічних термінах. Перший - це так зване термопружне демпфування. Коли низькочастотний фонон поширюється, він розширює та стискає решітку, що призводить до температурних коливань. Потік тепла між нагрітою та охолодженою областями призводить до виробництва ентропії та затухання фонона зі швидкістю

$$\tau_{\text{thermo}}^{-1} = \frac{\left[e_\alpha(\overrightarrow{kj})\kappa_\beta C_{\alpha\beta\gamma\delta}\alpha_{\gamma\delta}\right]^2 T\kappa_{\lambda\mu}\kappa_\lambda\kappa_\mu}{\rho\omega(\overrightarrow{kj})^2 C^2} \tag{12}$$

де e_α– елементи фононного вектора поляризації, $\kappa_{\lambda\mu}$– елементи тензора теплопровідності, $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$– пружні сталі другого порядку в тензорному записі,

C– питома теплоємність одиниці об’єму. Другий механізм — фононна в’язкість, також званий процес Ахіезера. Флуктуаційна деформація, пов’язана з низькочастотним фононом, підвищує частоту деяких високочастотних ($\omega \sim k_B T/\hbar$) фононів і знижує частоту інших. Це створює нерівноважний розподіл фононів, який створює ентропію під час релаксації. Швидкість демпфування в цьому процесі становить

$$\tau_{Vis}^{-1} = \frac{e_\alpha(\overrightarrow{kj})\kappa_\beta e_\gamma(\overrightarrow{kj})\kappa_\delta v_{\alpha\beta\gamma\delta}}{\rho} \tag{13}$$

де $v_{\alpha\beta\gamma\delta}$– елементи фононного тензора в’язкості. Обидва ці процеси дають затухання, пропорційне $\omega^2\bar{\tau}$, але загалом внесок в’язкості є більшим, ніж термопружний член. Швидкість демпфування в перехідному режимі, де $\omega\bar{\tau}$змінюється від менше одиниці до більшої ніж одиниця, є складною. Важливо зазначити, що це два різні режими, у яких застосовуються окремі формули. Таким чином, у $\omega\bar{\tau} > 1$режимі слід розрахувати швидкість загасання, використовуючи підхід зіткнення фононів; внесок від термопружного механізму та механізму Ахіезера не слід додавати.

Інший важливий процес розсіювання в кристалах, вільних від дефектів, — ізотопне розсіювання. У кубічному кристалі з одним атомом на елементарну комірку легко показати, що час життя фонона визначається як

$$\frac{1}{\tau(\overrightarrow{kj})} = \frac{\pi}{6} V_0 g_2 \omega^2(\overrightarrow{kj}) D(\omega(\overrightarrow{kj})) \tag{14}$$

де V_0– об’єм на атом, а g_2визначається як

$$g_2 = \sum_i f_i \left(\frac{\delta m_i}{\langle m \rangle}\right)^2 \tag{15}$$

де i – мітки різних ізотопів, f_i- частка ізотопу $i, \delta m_i$- це відхилення маси ізотопу iвід середньої маси $\langle m \rangle. D$- це фононна густина станів на одиницю об'єму. Можна показати, що така ж формула справедлива і для кремнію та германію. Ізотопне розсіювання має деяку схожість з ефектом Баркла для рентгенівських променів. Розсіювання від стану $\overrightarrow{kj}$до $\vec{k}'j'$пропорційне

$\left[\vec{e}(\overrightarrow{kj}) \cdot \vec{e}\left(\vec{k}'j'\right)\right]^2$. Так, наприклад, для розсіювання під кутом $\pi/2$поздовжній фонон, $\vec{k}$швидше за все, буде розсіяний на поперечний фонон з вектором поляризації приблизно в тому ж напрямку, що і $\vec{k}$.

Ізотопне розсіювання є ще одним прикладом процесу, для якого було б корисно краще зрозуміти корисність спрощених формул. Якщо порівняти рівняння (14) з формулою Клеменса, відразу видно, що різниця між рівняннями просто полягає в тому, що фононна густина станів була апроксимована моделлю Дебая, тобто була прийнята пропорційною квадрату частоти. Насправді, звичайно, щільність станів $D(\omega)$йде як ω^2тільки на низьких частотах. Більший $\omega, D(\omega)$зазвичай містить сильні піки, які походять із областей зони Бріллюена, де групова швидкість фононів мала. У діапазоні частот цих піків справжнє значення Dнабагато більше, ніж оцінка Дебая.

Після Cобчислення завершальним кроком є розв'язання рівняння. (1), щоб знайти розподіл фононів. Тоді тепловий струм $\vec{j}$можна отримати з

$$\vec{j} = \sum_{\overrightarrow{kj}} n(\overrightarrow{kj})\vec{v}(\overrightarrow{kj})\hbar\omega(\overrightarrow{kj}) \tag{16}$$

З обговорення вище зрозуміло, що навіть для масивного кристала обчислення теплопровідності є складним завданням. Один із способів спростити проблему - ігнорувати ядро колізій і писати

$$\left.\frac{\partial n(\overrightarrow{kj})}{\partial t}\right|_{\text{coll}} = -\frac{n(\overrightarrow{kj})}{\tau(\overrightarrow{kj})} \tag{17}$$

Це призводить до «наближення часу релаксації» для тензора теплопровідності

$$\kappa_{\alpha\beta} = \sum_{\vec{k}j} c_{\overrightarrow{kj}} v_\alpha(\overrightarrow{kj}) v_\beta(\overrightarrow{kj}) \tau_{\overrightarrow{kj}} \tag{18}$$

де $c(\overrightarrow{kj})$– внесок у питому теплоємність від фононної моди $\overrightarrow{kj}$. Для кубічного кристала провідність спрощується

$$\kappa = \frac{1}{3}\sum_{\vec{k}j} c_{\vec{k}j} v^2(\overrightarrow{kj})\tau_{\overrightarrow{kj}} \tag{19}$$

Існує кілька добре відомих труднощів із використанням цієї формули; старе, але все ще дуже корисне обговорення деяких проблем подано в книзі Зімана. Основна складність цієї формули полягає в тому, що незрозуміло, чи кожен тип процесу розсіювання слід включати в обчислення $\tau_{\overrightarrow{kj}}$. Ангармонійні процеси типу N дійсно змінюють напрямок розсіяного фонону, але залишають загальний потік енергії в даному напрямку практично незмінним. Таким чином, можна стверджувати, що ці процеси не сприяють тепловому опору, тому їх слід ігнорувати та Uрозглядати лише процеси. Але припустимо, що існує певна група фононів, які не можуть бути розсіяні в процесі U. Тоді, якщо знехтувати N процесами, теплопровідність буде нескінченною, що явно неможливо. Щоб правильно розглядати цю ситуацію, необхідно вийти за межі наближення часу релаксації та врахувати вплив як процесів N, так і U відповідним чином.

Щоб подолати ці труднощі, були зроблені кількісні розрахунки з використанням повного рівняння Больцмана. У 1996 році Оміні та Спаравінья повідомили про розрахунки для Ar і Kr з використанням точно розрахованого ядра зіткнень разом із розв’язком рівняння Больцмана. Для цих матеріалів міжатомний потенціал відносно простий. Зовсім недавно Бройдо та його колеги опублікували серію статей, у яких вони повідомляють про розрахунки такого типу для кремнію, германію та алмазу. Ці розрахунки значно складніші через більш складну форму міжатомного потенціалу. Результати добре узгоджуються з експериментом.

Звичайно, у чисельних розрахунках, інформація про час життя та ядро зіткнення міститься в програмі. Було б дуже цінно отримати цю інформацію і таким чином дізнатися більше про детальні фононні процеси, які відбуваються під час потоків тепла. Які фонони переносять найбільше тепла? Як час життя фонона змінюється залежно від хвильового вектора та

поляризації? Яке співвідношення нормальних процесів до процесів Umklapp і які фонони беруть участь в U-процесах? Спаравінья не надає графіка цієї інформації, але Уорд і Бройдо дійсно представляють графік тривалості життя поздовжніх фононів при 300 К, усереднений за всіма напрямками (рис. 3).

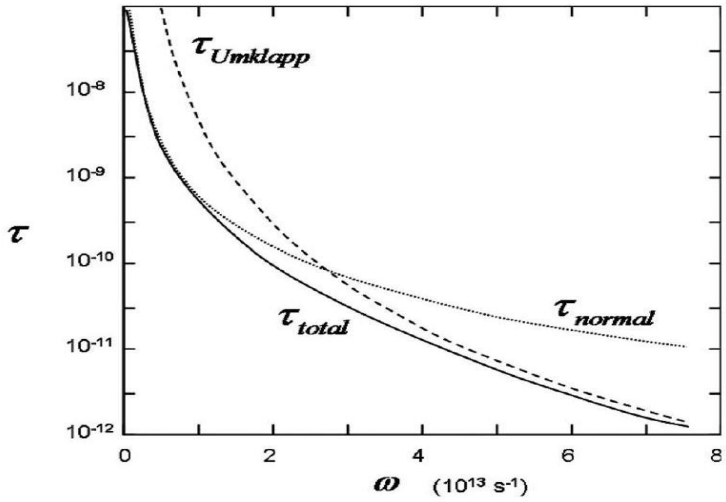


Рис.3. Розрахований час життя поздовжніх фононів у кремнії при 300 К як функція частоти.

Вони також поділяють внески в тривалість життя на процеси U та N. Ліндсей і Бройдо виявили кореляції між областю фазового простору, доступною для трифононних процесів, і теплопровідністю. Дослідження в цьому напрямку має потенціал, щоб дати вказівку на достовірність деяких наближень, які часто робляться в теоріях об'ємної теплопровідності. Наприклад, зазвичай передбачається, що хоча оптичні моди можуть впливати на тепловий потік, сприяючи швидкості розсіювання акустичних фононів, фактичне тепло, яке переноситься цими модами, не має значення. Було б добре знати, наскільки це надійне наближення.

Щоб обчислити тепловий потік у простій наноструктурі, такій як нанодрот, що складається з одного матеріалу, достатньо використовувати той самий час життя фонона та ядро зіткнення, що й для масивного матеріалу. Цей підхід вийде з ладу лише тоді, коли бічні розміри структури стануть порівнянними з довжиною хвилі фонону. Однак розрахунок теплового потоку набагато складніший, ніж для маси, оскільки тепер функція розподілу

фононів $n(\overrightarrow{kj})$змінюється по поперечних розмірах зразка. У циліндричному нанодроті, наприклад, розподіл фононів змінюється залежно від відстані rвід осі, і рішення для функції розподілу фононів має задовольняти рівняння Больцмана при кожному значенні r. Нещодавно було повідомлено про розрахунки для алмазного нанодроту; необхідно було зробити деякі наближення, щоб скоротити необхідний комп'ютерний час. В одностінній вуглецевій нанотрубці (SWCNT) ситуація простіша, оскільки фонони існують лише при одному значенні r. Розрахунки теплопровідності в SWCNT і в графені були виконані Lindsay та ін. Вони не дають подробиць про час життя фононів, але обговорюють відносну важливість процесів N і U.

Звичайно, якщо середня довжина вільного пробігу дуже велика порівняно з усіма розмірами зразка (режим Казимира), проблему можна вирішити. Тоді достатньо просто скласти внесок кожної з фононних мод, які збуджуються термічно. Для кожної моди можна розрахувати відстань $\Lambda_{\overrightarrow{kj}}$, яку фонон, покидаючи точку на поверхні структури, проходить у напрямку теплового потоку, перш ніж розсіюватися в іншій точці поверхні; ця відстань залежить від конкретної точки, з якої починається фонон. Для однорідного стержня довільного поперечного перерізу можна показати, що провідність визначається формулою

$$\kappa = \frac{\hbar^2}{16\pi^3 kT^2 A} \oint dl \sum_j \iiint \vec{v}_{\vec{k}j} \cdot \hat{e}(l) n_{\vec{k}j} \qquad (20)$$

де A– площа поперечного перерізу. Зауважте, що внесок моди залежить, серед іншого, від квадрата $\Lambda_{\overrightarrow{kj}j}$A, зміна мод, для яких вектор групової швидкості лежить у напрямку, близькому до напрямку теплового потоку, явно робить великий внесок. Насправді можна показати, що цей внесок настільки великий, що для теплового потоку в плоскому x-напрямку пластини товщиною в y-напрямку D і шириною в z, nDтеплопровідність розходиться логарифмічно, nпрямуючи до нескінченності.

РОЗДІЛ 2. ЗАСТОСУВАННЯ В ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ ТА ЕЛЕКТРОНІЦІ

Сучасні напівпровідникові пристрої та їхні складові матеріали та інтерфейси представляють одні з найбільш перспективних і складних можливостей для вивчення нанорозмірної теплопровідності. Приклади технологій і пристроїв включають високомасштабовані планарні або тривимірні (3-D) польові транзистори, пристрої пам’яті зі зміною фази на основі халькогенідів, лазери на фотонних кристалах і хвилеводи для оптичних з’єднань, а також композитні підкладки для силових напівпровідникових пристроїв. Розподіл температури в цих структурах, особливо поблизу інтерфейсів, споживає все більшу частку доступного «теплового бюджету» для електронних, оптоелектронних і підсилювальних схем. Хоча аналіз субконтинууму не завжди важливий для точного моделювання цих структур, ця ситуація поступово змінюється з продовженням розмірного масштабування, інтеграції гетерогенних матеріалів і геометрії, націленої на маніпуляції смугами електронів і фотонів. Розділ III C підсумовує три сфери особливого значення та пропонує майбутні нанорозмірні експерименти та моделювання.

2.1. Зберігання даних

У той час як генерація та транспортування тепла в логіці та з’єднаннях приділяють велику увагу, теплові явища в технологіях зберігання даних також дуже актуальні через витік енергозалежної пам’яті та величезну кількість використовуваних елементів пам’яті. У цьому контексті матеріали зі зміною фази (PCM) привернули широкий інтерес до пам'яті та перепрограмованих схем із низькою напругою, швидким перемиканням та високою довговічністю. Дані в електрично програмованих PCM зберігаються як зміни бітового опору, які можна оборотно перемикати короткими імпульсами напруги та локалізованим джоулевим нагріванням. Однак

недоліком PCM є їх високий струм програмування (> 0.1 mA), оскільки джоулеве тепло має бути доставлено до кінцевого об’єму біта.

Можна дослідити розподіл аморфного та полікристалічного матеріалу в комірці пам’яті з довільним доступом зі зміною фази (PCRAM), яка була піддана змінним рівням струму програмування. Ключові показники для сучасних пристроїв включають енергію перемикання та час, які регулюються теплопровідністю та кінетикою кристалізації в областях GST сплавів з розмірами менше 10 нм. Для дослідницьких пристроїв зі зміною фази, таких як ті, що розроблені для обчислень, натхненних мозком, нанорозмірна теплопровідність керує поетапним переходом від аморфної до кристалічної фази під час імпульсного електричного нагрівання. Тимчасова стабільність аморфної області є ще однією складною темою дослідження, яка має вирішальне значення для передових конструкцій клітин, включаючи ті, що націлені на багатобітну роботу.

Дослідження теплового транспорту в PCM вивчали вплив [10] властивостей інтерфейсу, чистоту фази та відносний внесок електронів і фононів у транспорт. Температурно-залежні теплопровідності аморфної та полікристалічної гранецентрованої кубічної (ГЦК) та гексагонально щільно упакованої (ГПУ) фаз плівок GST та кількох стехіометричних варіантів були виміряні за допомогою часової області термовідбиття та наносекундної перехідної термовідбиття (TTR). Електрони вносять свій внесок ~ $1\mathrm{Wm^{-1}\,K^{-1}}$у ГПУ кристалічну фазу та допомагають збільшити теплопровідність майже в чотири рази порівняно з аморфною та ГЦК фазами. Досліджуючи стехіометричні зміни, включаючи чистий GeSb, внесок електронів можна змінювати майже в 5 разів. Електротермічні вимірювання з використанням підвішених наноструктур і 3ω методу виявили сильну анізотропію в плівках змішаної фази, яка пояснюється вирівнюванням аморфного матеріалу вздовж вертикально орієнтованих меж зерен. Дані про теплові властивості залишаються терміново необхідними для розплавленого стану.

Термічний граничний опір (TBR) PCM з навколишньою пасивацією та матеріалами електродів (наприклад, SiO_2, SiN_x, і TiN) також є ключовими для енергоефективної роботи осередку пам'яті. TBR $Ge_2Sb_2Te_5$важко передбачити через порівнянний внесок як електронів, так і фононів у тепловий потік у фазі ГПУ та велику невідповідність акустичних властивостей по відношенню до звичайних металів і діелектриків. Рання робота виявила сильне зменшення TBR з невпорядкованими $ZnS: SiO_2$плівками через перехід до кристалічної фази. У більш пізніх роботах було виміряно відносно великий TBR щодо матеріалів електродів пристрою та змодельовано їхній великий вплив на струм запису для вертикальної геометрії комірки.

Термоелектричний транспорт може мати великий вплив на температурні поля в нанопристроях PCM і може сильно впливати на струм запису. Для процесу скидання до аморфної фази нагрівання Пельтьє на межі розділу електродів і нагрівання або охолодження Томсона в кристалічній фазі халькогенідного матеріалу можуть регулювати розмір аморфної області, що виникає в результаті даного імпульсу струму. Нанорозмірне електротермічне моделювання ускладнюється розміром і температурною залежністю термоелектричних властивостей $Ge_2Sb_2Te_5$. Експериментальні дані демонструють різну величину

Недавня робота [11] також досліджувала фундаментальні межі масштабування PCRAM з використанням електродів, виготовлених із вуглецевих нанотрубок, а не з металів. ВНТ можуть мати вищу електропровідність і можуть бути надійнішими за метали до діаметрів лише ~ 2 nm; таким чином, вони можуть утворювати електроди, що контактують з бітами ПКМ розміром лише десятки кубічних нанометрів. Напилення ~ 10 nmGST заповнює нанощілину, утворюючи надзвичайно маленький біт PCM із двома електродами CNT. Такі пристрої перемикаються з струмами програмування $\sim 1\mu$ A, що на два порядки менше, ніж у попереднього рівня

техніки, і енергією програмування $< 100\text{fJ}$на біт. Тестування сотень таких структур виявило тенденції, які свідчать про те, що PCRAM можна зменшити, щоб досягти суб-фДж на біт у бітах суб-5 нм. Таким чином, фундаментальні робочі межі РСМ ще не досягнуті, і ці межі встановлюються фазовими перетвореннями та нагріванням на одиничних нанометрових розмірах.

Ще одна технологія пам'яті [12], для якої термічний транспорт відіграє центральну роль, – це магнітний запис із підтримкою тепла (HAMR), який включає випромінювання ближнього поля, балістичну тонкоплівкову провідність, опір розділу та нанорозмірний транспорт мастила. Радіаційне нагрівання ближнього поля, посилене та локалізоване через плазмонне збудження, повинно нагрівати $\sim 10\,\text{nm}$пляму в носії запису вище температури Кюрі (зазвичай вище $\sim 500^{\circ}\text{C}$) в $\sim 1\,\text{ns}$. Носій запису складається з металевих і діелектричних наношарів товщини $10-40\,\text{nm}$разом із функціональною магнітною плівкою. Ефективна теплопровідність цього пакету є високоанізотропною та регулюється розсіюванням електронів і фононів і перетворенням енергії. Одним із завдань є оптимізація складної багатошарової системи, враховуючи як поглинання фотонів, так і тимчасову, анізотропну теплопровідність, щоб мінімізувати бокові розміри гарячої точки.

Теплопровідність в електроніці починається з енергії, що розсіюється в нанорозмірних транзисторах і з'єднаннях. Комплементарні металооксидно-напівпровідникові (КМОП) польові транзистори (FET) є будівельними блоками сучасної електроніки, як правило, на основі кремнієвої технології з характеристиками до. $\sim 28\,\text{nm}$.Проте пристрої для масштабування до розмірів менше 10 нм, ймовірно, включатимуть нові матеріали з груп III-V, таких як GaAs, InAs, або InSb,групи IV, таких як Ge або C, які мають електронні властивості (наприклад, мобільність). всіх випадках розсіювання потужності починається з електронів або дірок, які прискорюються сильними

електричними полями порядку $\sim 10\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$. Варто зазначити, що час охолодження однієї вуглецевої нанотрубки, $\sim 0.1\,\mathrm{ns}$,ймовірно, представляє найменшу температурну постійну часу, досяжну в пристрої CMOS. Термічна постійна часу нанорозмірного пристрою показує, наскільки швидко він охолоджується або нагрівається після електричного перехідного процесу, і такі температурні екскурсії визначають як витік пристрою, так і довгострокову надійність.

Коли нанорозмірний пристрій досягає теплового стаціонарного стану, шлях теплопровідності до навколишнього середовища є ключовим у визначенні підвищення його температури та, зрештою, його надійності. Підвищення температури сучасного пристрою може досягати $\Delta T > 100$ Квище кімнатної температури, що визначається його споживаною потужністю Pта термічним опором R_{TH}, як $\Delta T = PR_{TH}$. Наприклад, термічний опір одного пристрою на поверхні кремнієвої пластини становить приблизно $R_{si} \approx 1/(2\kappa_{Si}D)$, де $D \approx (LW)^{1/2}, L$і $W-$ довжина та ширина. Однак, оскільки пристрої зменшуються, слід враховувати чотири додаткові міркування теплового потоку. По-перше, теплопровідність до контактів або електрода затвора може відігравати більшу роль. По-друге, нові пристрої (наприклад, FinFET, нанодроти та CNT) містять багато інтерфейсів між корпусом напівпровідника, де відбувається розсіювання, та зовнішнім радіатором. Таким чином, необхідно ретельно враховувати відповідні термічні граничні опори. По-третє, нанорозмірні пристрої менші за середню довжину вільного пробігу об'ємного фонону $\Lambda \approx 100\,\mathrm{nm}$в кремнію та такі ж у більшості напівпровідників. Таким чином, теплопровідність нижча за добре відомі об'ємні значення, наприклад, у $\sim 20\,\mathrm{nm}$тонкої плівки кремній на ізоляторі (SOI)$\kappa_{\mathrm{SOI}} \approx 25\ \mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$порівняно з теплопровідністю об'єму. Si, $\kappa_{Si} \approx 150\mathrm{Wm^{-1}\,K^{-1}}$. По-четверте, сучасні пристрої мають перехідні процеси електричного перемикання порядку $10-100\mathrm{ps}$, коливаючись між подіями розсіювання носіїв ($0.1-1\mathrm{ps}$) і тепловою релаксацією решітки ($\sim$

10 ns). Таким чином, нанорозмірні пристрої працюють у складному часовому режимі, де можуть виникати нерівноважні ситуації між електронами, ОП та решіткою, теплоємність якої в основному визначається акустичними фононами.

2.3. Композитні підкладки для силової електроніки

Нанорозмірна передача тепла може бути особливо важливою в напівпровідникових пристроях, які передають або модулюють потужність. Приклади включають напівпровідникові лазери, силові перемикачі з ефектом поля та радарні підсилювачі, які можуть мати густину потужності, що перевищує $1\,\mathrm{kW/cm^2}$. Удосконалення були особливо швидкими для квантових каскадних лазерів (QCL), які досягають ефективного регульованого випромінювання середньої інфрачервоної довжини хвилі через квантове обмеження в багатошарових GaInA/AIInAs.

Композитні підкладки [13] спрямовані на те, щоб розповсюджувач тепла з вищою теплопровідністю, такий як SiC або алмаз, знаходився в межах мікрометрів від активних напівпровідникових областей. Зазвичай це досягається шляхом склеювання або безпосереднього вирощування функціонального напівпровідника на підкладку з високою теплопровідністю, таку як CVD алмаз. Евтектичне з'єднання QCL з алмазною підкладкою дало високоякісний алмаз приблизно 5μ mз активної епітаксійної області. Однак нижню межу термічного опору можна досягти лише шляхом потоншення або усунення кріпильної плівки. Прогрес у створенні таких композитних підкладок був особливо швидким для транзисторів з високою рухливістю електронів (HEMT), для яких термічний опір підкладки було зменшено через зростання гетероструктури GaN на SiC алмазі або приєднання до нього.

Підсумовано вплив теплових опорів у композитних підкладках GaN на їх відносну здатність розподіляти тепло, а також на механізми розсіювання фононів, які впливають на термічний опір. Щоб значно перевершити GaN –

SiC, опір розділу GaN-алмаз повинен наближатися до прогнозів DMM за наближенням Дебая, що є близьким до $1\ \mathrm{m}^2\ \mathrm{KGW}^{-1}$. Хоча підхід Дебая дає певну похибку через дисперсію фононів, завдання для матеріалознавства очевидне: значно зменшити концентрацію дефектів у межах нанометрів складної межі.

Завдання для спільноти нанорозмірних теплових транспортних засобів полягає в тому, щоб виміряти та визначити конкретні мікроструктурні причини опорів на інтерфейсах приблизно на мікрометр нижче поверхні. Ефективний опір межі розділу підсумовує компоненти на дискретних поверхнях розділу матеріалу з ефектами розсіювання дефектів у двох основних матеріалах підкладки та перехідній плівці [14 – 32]. Процедури виготовлення алмазної композитної підкладки включають пряме нарощування напівпровідника на алмазі, у деяких випадках з перехідним шаром, і нарощування алмазу на напівпровіднику або дуже тонкій адгезійній плівці. Був досягнутий певний прогрес у співвідношенні концентрацій точкових дефектів і дислокаційних сегментів у перехідній області з умовами росту металоорганічних хімічних осаджень з парової фази (MOCVD) AlN/GaNна SiC.Майбутні роботи з алмазними композитами повинні пов’язати концентрації специфічні види дефектів і домішок до термостійкості. Оптимальні методи виготовлення GaN-алмазу, тобто ті, які дають найменшу концентрацію дефектів у напівпровіднику та найнижчий термічний опір на його межі з алмазом, залишаються невизначеними. У випадку росту алмазу на функціональній напівпровідниковій перехідній плівці дефекти в алмазі можуть погіршити поширення тепла. Був прогрес у вимірюванні та моделюванні впливу розсіювання фононів на дефекти поблизу межі осадження з кремнієм та оптимізації параметрів зародження для мінімізації ефективного теплового опору межі.

РОЗДІЛ 3. ТЕПЛООБМІН У ПРОВІДНИКАХ ЦИЛІНДРИЧНОГО ПЕРЕРІЗУ З ДИФУЗІЙНИМ ГРАНИЧНИМ РОЗСІЮВАННЯМ

3.1. Вступ до розділу

Перенесення тепла в балістичному режимі поширення фононів знову викликало інтерес у зв’язку з необхідністю розуміння теплових властивостей наноструктур і твердих тіл при досить низьких температурах або розмірах, де взаємодією між теплоносіями можна знехтувати. У цьому режимі тепловий опір провідника визначається відбивними властивостями бічних стінок провідника. Найвідомішою проблемою в цій галузі є визначення теплових потоків і температурних профілів вздовж провідників за дифузних граничних умов, тобто коли фонон, що падає на бічну стінку провідника, відбивається від нього з однаковою ймовірністю в усіх напрямках. При такому формулюванні рух фононів стає еквівалентним руху розрідженого газу в режимі Кнудсена з наближенням повної акомодації частинок при відбиванні на межі.

Для фононів таке аналогічне трактування вперше було розглянуто Казимиром , який вказав на еквівалентність між потоком класичних частинок під дією градієнта тиску та рухом фононів під градієнтом температури. У [33] і [34] передбачалося, що зовнішні джерела створюють градієнт рушійної сили (тиску або температури), а довжина провідника формально вважалася нескінченною.

Слідуючи роботам Кнудсена, рух розрідженого газу під дією різниці тисків між кінцями труби кінцевої довжини було розв'язано Клаузінгом. Знайшов інтегральне рівняння, яке описувало координатну залежність потоку частинок на бічній границі. Це ж рівняння застосовувалося для дослідження теплових потоків у циліндричному провіднику зі змішаним дзеркальним і дифузним відбиттям фононів від бічної межі, а також у двовимірних наноструктурах для випадку чисто дифузного відбиття. У цих роботах

використовувалися чисельні ітераційні методи розв'язування інтегральних рівнянь.

У даній роботі досліджено теплообмінні властивості в тривимірних циліндричних провідниках скінченної довжини в балістичному режимі поширення фононів. Ми пропонуємо простіший матричний підхід для розв’язування таких інтегральних рівнянь та аналітичне наближене рішення. Тому наш підхід є узагальненням моделей Кнудсена та Казимира на циліндричні провідники кінцевої довжини. Його також можна узагальнити для різних поперечних перерізів провідника та включати частково дзеркальне відбиття від бічної межі.

3.2. Складання інтегрального рівняння та його розв’язання

Згадаймо виведення вихідного інтегрального рівняння для розподілу температури по бічних границях циліндричного провідника. У тривимірному випадку, коли межами є поверхні, потік частинок між двома нескінченно малими елементами поверхні, що випромінюють, поглинають або відбивають, задається відомим співвідношенням:

$$F_{12} = \frac{1}{\pi}\frac{(\mathbf{n}_1\mathbf{r}_{12})(\mathbf{n}_2\mathbf{r}_{21})}{r_{12}^4} = \frac{1}{\pi}\frac{\cos\,\theta_1 \cos\,\theta_2}{r_{12}^2}. \qquad (21)$$

Тут n_1 і n_2 – нормальні одиничні вектори до цих елементів поверхні, r_{12} – вектор від одного елемента до іншого; значення π визначає нормалізацію. Це співвідношення описує ізотропний кутовий розподіл випромінюючих частинок (закон Ламберта), а для відбитих частинок описує повну акомодацію.

З моменту його формулювання, співвідношення (21) широко використовувалося для опису ефекту Кнудсена та потоків частинок у розріджених класичних газах, а також для дослідження радіаційного теплообміну у фононних системах твердих тіл .

Піонерські результати Кнудсена, який запропонував ідею опису потоків частинок у балістичному режимі в нескінченно довгих трубах, були узагальнені Клаузінгом, який розглядав проблему переміщення розрідженого газу по трубах кінцевої довжини. Клаузінг запропонував інтегральне рівняння, яке можна записати в такому узагальненому вигляді:

$$\Psi_e(r_e) = \int_{S_{heater}} F(r_h, r_e)\Psi_{heater}(r_h)dr_h$$

Цей вираз описує потік енергії падаючих (і відбиваючих) частинок $\Psi_e(r_e)$у заданому місці r_eна бічній поверхні. Перший доданок відповідає фононам, які випромінюють нагрівач з потоком енергії $\Psi_{heater}(r_h)$і прямують до заданої точки на бічній поверхні без відображень. Другий доданок відповідає фононам, які спрямовані в цю точку безпосередньо від охолоджувача, який випромінює фонони з потоком енергії $\Psi_{cooler}(r_c)$. Вважаючи, що випромінювання від поверхонь нагрівача і охолоджувача є рівномірними, ці функції можна розглядати як константи $\Psi_{heater}(r_h) = \Psi_{heater}$ і $\Psi_{cooler}(r_c) = \Psi_{cooler}$ зняти за знак інтегрування. Для класичних частинок зовнішні потоки визначаються тиском і температурою джерела з використанням розподілу Максвелла, а для теплових фононних систем — температурою з використанням формули випромінювання чорного тіла Планка.

Третій член у рівнянні (22a) описує фонони, які вже були відбиті один або кілька разів від бічних кордонів. Через циліндричну симетрію задачі їх густина потоку енергії залежить лише від поздовжньої координати $\Psi_e(r_e) = \Psi_e(x)$. З цієї ж причини функції Fтакож мають простіший вигляд: $F(r_h, r_e) = F(r_h, x)$, $F(r_c, r_e) = F(r_c, x)$, та $F(r_e', r_e) = F(x', x)$.

Потім, для простоти, дотримуючись посилань [35 – 37], ми зрушили та нормалізували всі потоки енергії частинок за допомогою виразу $\Phi = (\Psi - \Psi_{cooler})/(\Psi_{heater} - \Psi_{cooler})$. При цьому позначенні потік енергії від нагрівача стає рівним одиниці $\Phi_{heater} = 1$, тепловий потік охолоджувача

дорівнює нулю $\Phi_{cooler} = 0$, а тепловий потік відбитих (падаючих) фононів у певній точці бічної границі визначається виразом $\Phi(x) = (\Psi_e(x) - \Psi_{cooler})/(\Psi_{heater} - \Psi_{cooler})$.

Для функцій, перевизначених таким чином, інтегральне співвідношення (22а) стає таким:

$$\Phi(x) = \int_{S_{source}} F(r_s, x)dr_s + \int_{S_{edge}} dr_e \Phi(r_e)F(r_e, x) \qquad (22b)$$

Перший член у рівнянні (22б) визначає потік частинок, що надходить у задану точку на бічній поверхні поперечного перерізу з координатою xз усієї площі джерела $S_{source.}$. Другий член описує частинки, які падають в дану точку бічної поверхні з поздовжньою координатою xз точок елемента поверхні, розташованих по периметру поперечного перерізу провідника, який знаходиться в координаті x_1.

Зокрема, для циліндричного зразка скінченної довжини L та діаметра D рівняння (22b) набуває вигляду :

$$\Phi(X) = \frac{1}{2}\left\{\frac{1 + 2X^2}{\sqrt{1 + X^2}} - 2X\right\} \qquad (23)$$

Тут координата хнормована на діаметр циліндричного провідника $X = x/D$. Нагрівач має координату $x = 0$, а координата охолоджувача $x = L$.

При дослідженні теплових потоків квазічастинок термотермостати розглядають як резервуари, що забезпечують постійну температуру нагрівача та охолоджувача на торцях зразка. Для плоских зразків, таких як нанострічки або наноплівки, відповідне рівняння було виведено в [38].

Рівняння (23) належить до сімейства інтегральних рівнянь Фредгольма другого роду, і ми повинні розв’язувати його чисельно за допомогою ітераційного або матричного методу. Перевага ітераційного методу, який детально описаний у роботі [39], полягає в тому, що послідовна ітерація відповідає послідовному відбиванню фонона від бічної стінки. Це дає змогу визначити повну довжину пробігу фонона всередині провідника. До

недоліків ітераційних методів можна віднести тривалий час збіжності, особливо у випадку довгих і вузьких провідників.

Досить стандартна для розв'язування таких інтегральних рівнянь матрична техніка відразу дає кінцевий бажаний результат, але не дозволяє визначити особливості руху частинок усередині провідника чи узагальнити розв'язки на випадок урахування можливого дзеркального відбиття чи розсіювання частинок усередині провідника.

Крім того, для довгих і тонких провідників виникає проблема накопичення похибок, тому результати недостатньо точні, і для отримання правильних результатів необхідно використовувати додаткові методи. У цій роботі ми застосуємо наближений аналітичний метод разом із матричним методом і покажемо, що їх одночасне використання дозволяє отримати результати з бажаним ступенем точності.

Для застосування матричного методу нормалізацію поздовжньої координати змінюємо x з нормування по поперечному розміру (діаметру) $X = \frac{x}{D}$ на нормування по поздовжньому розміру $\tilde{X} = x/L$, тобто на довжину провідника L. Формально розглядаються провідники одиничної довжини, але різного діаметру. У поздовжніх змінних, нормованих на довжину провідника, інтегральне рівняння (3) набуває вигляду

$$\Phi(\tilde{X}) = g(\tilde{X}) + \int_0^1 h\left(\tilde{X}_1 - \tilde{X}\right)\Phi\left(\tilde{X}_1\right)d\tilde{X}_1 \qquad (24)$$

де неоднорідність має вигляд

$$g_{Cyl}(\tilde{X}) = \frac{1}{d}\left\{\frac{\tilde{X}^2 + d^2/2}{\sqrt{\tilde{X}^2 + d^2}} - \tilde{X}\right\} \qquad (25)$$

де $d = D/L$, і ядро

$$h_{Cyl}(\tilde{X}) = \frac{1}{d}\left\{1 - |\tilde{X}|\frac{\tilde{X}^2 + 3d^2/2}{\left(\tilde{X}^2 + d^2\right)^{3/2}}\right\}. \qquad (26)$$

Далі ділянку провідника розбивали на певну кількість Nкомірок з координатами $\tilde{X}_n = n/N, n = 1, \ldots, N$. Тоді з рівняння (24) отримуємо систему

лінійних рівнянь для значень $\Phi_n = \Phi(\tilde{X}_n)$нормованого параметра, що визначає густину потоку частинок у кожній комірці:

$$\Phi_n = g_n + \sum_{m=1}^{m=N} h_{nm}\Phi_m \qquad (27)$$

Тут вектор неоднорідності та матричні коефіцієнти визначаються співвідношенням $g_n = g(\tilde{X}_n)$і $h_{nm} = h(\tilde{X}_m - \tilde{X}_n) = h(|\tilde{X}_m - \tilde{X}_n|)$.

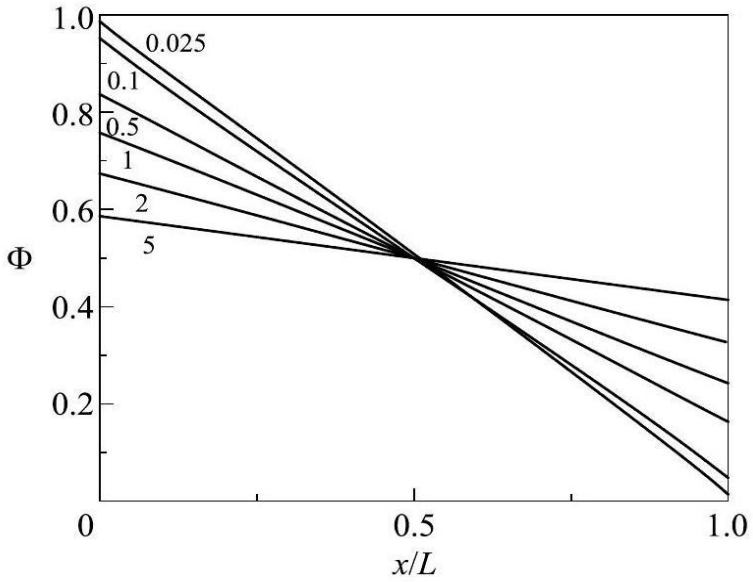


Рис. 4. Профіль потоку енергії в циліндричних провідниках для деяких відношень діаметра до довжини, вказаних на малюнку. зональний для коротких і широких провідників і має максимальний (майже одиничний) нахил для довгих вузьких провідників.

Повний розв’язок зводиться до розв’язання системи лінійних рівнянь. (27), що дозволяє отримати результати для профілю потоку для провідників різного відношення довжини до діаметра. Приклад отриманих результатів для профілю потоку для деяких співвідношень довжини Lдо поперечного розміру (діаметра D) представлено на рис. 4. Отриманий графік відображає добре відомий результат про те, що залежність потоку енергії частинок, що падають на бічні стінки в заданому місці, є практично лінійною функцією.

Така поведінка дозволяє розглянути наступну лінійну апроксимацію для аналітичного опису координатної залежності величини $\Phi(\tilde{X})$:

$$\Phi_{\text{linear}}(\tilde{X}) = \frac{1}{2} + \Delta\Phi(L, D)\left[\frac{1}{2} - \tilde{X}\right] \tag{28}$$

з коефіцієнтом $\Delta\Phi(L, D)$, який виявляється функцією розмірів провідника.

Це наближення спочатку було запропоновано Клаузінгом [35] для дослідження розріджених газів у трубках, а в роботі 10 ми використали його для дослідження теплових потоків у двовимірних наноструктурах.

Таким чином, якщо ми шукаємо розв'язок рівняння. (24) у вигляді (28) задача зводиться до знаходження різниці $\Delta\Phi(L, D)$потоків енергії на кінцях провідника. У роботі Клаузінга [35] обговорювалися різні пропозиції щодо вибору цієї величини, як, наприклад, мінімізація відхилення числового рішення та аналітичного по всій довжині провідника. У [36-38] запропоновано знаходити коефіцієнт $\Delta\Phi(L, D)$таким чином, щоб функція (28) точно відповідала розв'язку інтегрального рівняння. (24) на кінцях провідника. тобто

$$\Phi_{\text{linear}}(\tilde{X} = 0) = g(\tilde{X} = 0) + \int_0^1 h\left(\tilde{X}_1\right)\Phi_{\text{linear}}\left(\tilde{X}_1\right)d\tilde{X}_1 \tag{29}$$

і $$\Phi_{\text{linear}}(\tilde{X} = 1) = g(\tilde{X} = 1) + \int_0^1 h\left(\tilde{X}_1 - 1\right)\Phi_{\text{linear}}\left(\tilde{X}_1\right)d\tilde{X}_1. \tag{30}$$

Завдяки симетрії розв'язку $\Phi(\tilde{X}) = 1 - \Phi(1 - \tilde{X})$відносно середини провідника ці дві умови не суперечать одна одній і є достатніми для визначення коефіцієнта $\Delta\Phi(L, D)$.

Нагадаємо, що для двовимірного випадку було отримано такий простий аналітичний вираз для різниці потоків енергії $\Delta\Phi(L, D)$на кінцях нанострічки:

$$\Delta\Phi(L, W) = \left(1 + \frac{4W}{L}\frac{\sqrt{L^2 + W^2}}{L + W + \sqrt{L^2 + W^2}}\right)^{-1} \tag{31}$$

де W– ширина двовимірного провідника. У випадку циліндричного провідника, з рівнянь. (9) і (10), ми отримуємо трохи більш громіздкий вираз для цієї різниці.

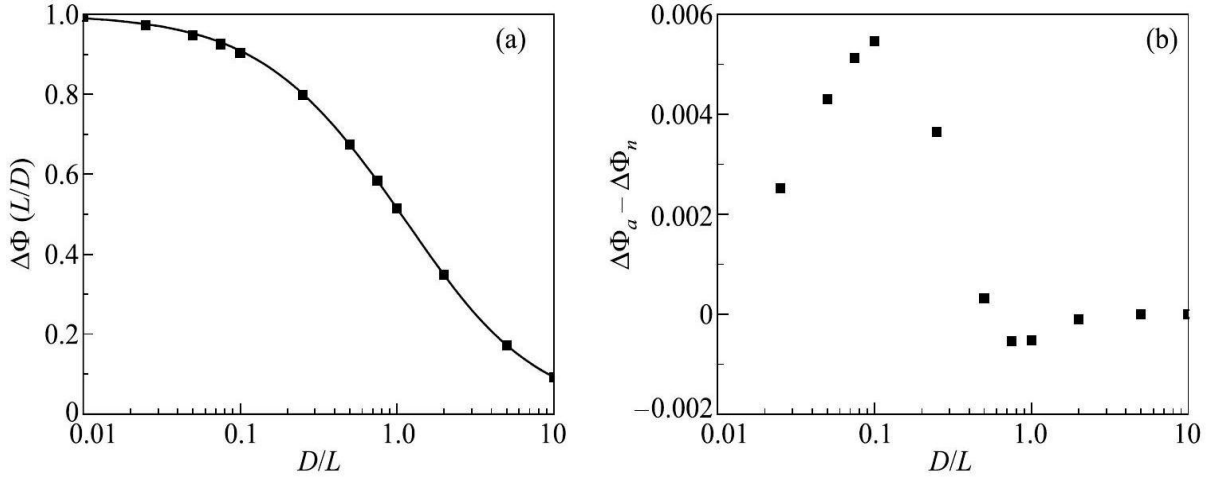


Рис. 5. (a) Залежність різниці $\Delta\Phi(L,D)$від відношення діаметра до довжини циліндричного провідника. Крапки представляють результати чисельного розрахунку рівняння. (7) а лінія відноситься до розрахунку за формулою. (12). (b) Різниця між аналітичною апроксимацією $\Delta\Phi_a$[Рівняння (12)] та значення $\Delta\Phi_n$, отримане в результаті чисельного розрахунку за рівнянням. (7) як функція відношення діаметра до довжини.

Незважаючи на свою громіздкість, вона з деякою точністю справедлива для довільних відношень довжини циліндричного провідника до його діаметра і узагальнює інші наближення, зроблені для коефіцієнтів $\Delta\Phi(L,D)$іншими авторами, починаючи з робіт Клаузінг [35].

На Рис.5(a) показано порівняння значення, $\Delta\Phi(L,D)$знайденого чисельними розрахунками з використанням рівняння. (7) і задана наближеним аналітичним виразом (8) для різних значень відношення діаметра до довжини D/L. Різниця між цими значеннями показана на рис. 22(b), і з малюнка ми бачимо, що різниця між аналітичним виразом і чисельними розрахунками не перевищує $6\cdot10^{-3}$. Цей результат дозволяє нам використовувати явний вираз для профілю потоку енергії $\Phi(\tilde{X})$ для вивчення теплотранспортних властивостей циліндричних провідників у наступному розділі.

3.3. Тепловий потік у циліндричному провіднику

Рівняння, знайдене для потоку енергії частинок $\Phi(\tilde{X})$у кожній точці поверхні провідника, дозволяє визначити сумарний тепловий потік, який передається теплоносіями (фононами) від нагрівача до охолоджувача як безпосередньо, так і після відбиття від стінок. Для початку необхідно визначити тепловий потік тих фононів, які після відбиття від бічних стінок повертаються до нагрівача і поглинаються ним:

$$Q_h = \int_0^L g(\tilde{X})\Phi(\tilde{X})dA(x) = P\int_0^L g(\tilde{X})\Phi(\tilde{X})dx \tag{33}$$

Тут A— площа поперечного перерізу в точці x, а P— периметр поперечного перерізу в точці x. З цього ми отримуємо щільність потоку

$$q_h = \frac{Q_h}{A} = \frac{P}{A}\int_0^L g(\tilde{X})\Phi(\tilde{X})dx = \frac{4}{D}\int_0^L g(\tilde{X})\Phi(\tilde{X})dx \tag{34}$$

Використовуючи закон збереження, ми отримуємо сумарний тепловий потік, який йде до раковини (охолоджувача)

$$q_c = 1 - q_h = 1 - \frac{4}{D}\int_0^L g(\tilde{X})\Phi(\tilde{X})dx \tag{35}$$

Тепер ми можемо використовувати аналітичні рівняння. (8) і (15) і отримаємо явний вираз для теплового потоку, а отже, і для коефіцієнта теплопровідності

$$q_c(L,D) = 1 - \frac{1+\Delta\Phi(L,D)}{2}Q_0(L,D) + \frac{\Delta\Phi(L,D)}{L}Q_1(L,D) \tag{36}$$

тут,

$$Q_0(L,D) = \frac{2}{D^2} L\left(\sqrt{D^2+L^2} - L\right) \tag{37}$$

і

$$Q_1(L,D) = \frac{4}{3D^2}\left\{(D^2+L^2)^{3/2} - D^3\right. \tag{38}$$

Отримане загальне рівняння дає відомий класичний результат Кнудсена і Казимира у випадку, коли градієнт температури на стінках провідників задається зовнішніми джерелами, тобто $\Delta\Phi(L,D) = 1$, і коли провідник розташований симетрично відносно точки $x = 0$, тобто

$$\Phi_{\text{Knudsen}}(\tilde{X}) = 1 - \tilde{X}, -1 < \tilde{X} < 1 \tag{39}$$

У цьому випадку з рівнянь. (25) і (29), або безпосередньо з рівняння. (26) отримуємо

$$Q_{\text{grad}}(L,D) = 2(1 - Q_0(L,D)) + \frac{2}{L} Q_1(L,D) \tag{40}$$

або

$$Q_{\text{grad}}(L,D) = 2\left(1 - \frac{2}{D^2} L\left(\sqrt{D^2+L^2} - L\right)\right.$$
$$\left. + \frac{1}{L}\frac{4}{3D^2}\left\{(D^2+L^2)^{3/2} - D^3 - \frac{3}{2}D^2\left(\sqrt{D^2+L^2} - D\right) - L^3\right\}\right)$$

Тепер, прямуючи довжину Lпровідника до нескінченності, ми отримуємо класичний відомий результат для нормованої течії в циліндричному провіднику:

$$Q_{\text{Knudsen}}(L,D) = \frac{4D}{3L} \tag{41}$$

У загальному випадку провідників заданої скінченної довжини вираз для теплового потоку виявляється більш складним і суттєво відрізняється від виразу (21), коли довжина і діаметр провідника одного порядку.

На рис. 6 показано порівняння результатів чисельного розрахунку та аналітичного результату для теплового потоку. На рисунку також показано залежність, визначену за класичною формулою [Рівн. (21)]. З малюнка видно, що ця залежність наближається до нашого точного розв’язку [Рівн. (16)] зі збільшенням довжини провідника, але все одно відрізняється від нього на

12%, навіть коли співвідношення $L/D = 100$. З рисунку видно, що аналітична формула досить добре відповідає результатам точного чисельного розв'язку інтегрального рівняння (16). (4) у великому діапазоні відношень діаметра до довжини провідника.

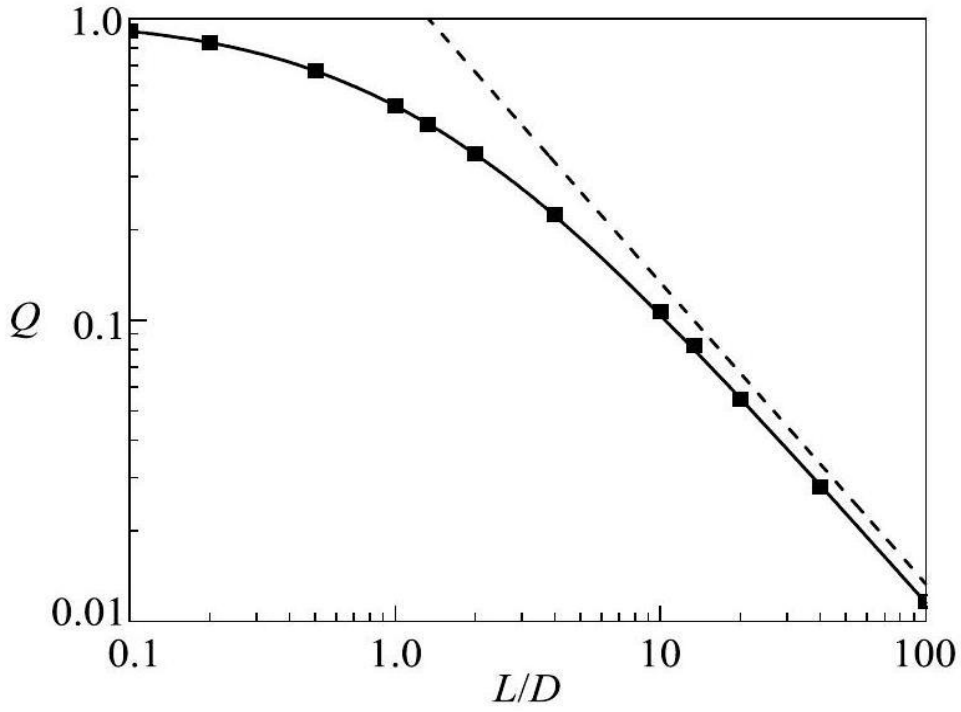


Рис. 6. Залежність нормованого теплового потоку у циліндричному провіднику від відношення довжини до діаметра L/D. Точки відповідають результатам точного чисельного розв'язку вихідного рівняння. (4) суцільною лінією – аналітична залежність (16), а штрихова лінія – класична у моделі Кнудсена [33]. через циліндричні провідники з різним співвідношенням діаметра до довжини.

3.4. Обговорення дифузного розсіювання

Дослідимо теплотранспортні властивості циліндричних діелектричних теплопровідників у балістичному режимі поширення фононів з повним дифузійним відбиттям фононів від бічних стінок. При цьому необхідною

умовою є те, щоб довжина хвилі фонона була набагато меншою за розмір провідника, тобто його діаметр. З цієї причини запропонована модель може бути незастосовна при дуже низьких температурах і для дуже вузьких нанодротів.

У рамках запропонованої моделі інтегральне рівняння, що описує фононний потік енергії в певних точках на межі було розв’язано чисельно та за допомогою наближеного аналітичного виразу . Отриманий розв’язок дозволив вивести явні формули для теплового потоку вздовж провідника для випадку, коли різниця температур прикладена до кінців провідника для будь-якого співвідношення діаметра до довжини.

Отримані результати відрізняються від відомих результатів режиму Кнудсена для розрідженого газу та моделі Казимира для фононного теплового потоку в циліндричних провідниках з двох фізичних причин. Перший з них полягає в тому, що вздовж бічної стінки провідника прикладається певний температурний градієнт, а не різниця температур лише по кінцях, як у нашій моделі. Другою причиною є наближення нескінченно довгого провідника в їхніх моделях. Беручи до уваги ці два наближення, загальний результат дає добре відомий результат режиму Кнудсена для розрідженого газу. Отже, отриманий нами розв’язок узагальнює формули для межі Кнудсена на випадок провідника скінченної довжини.

3.5. Вплив граничного відбиття та розміру на перенесення тепла в циліндричних провідниках

У цьому звіті ми розглядаємо теплові потоки, що переносяться фононами за низьких температур, де взаємодією фонон-фононів можна знехтувати. Для вивчення формування теплових потоків у циліндричних провідниках ми запропонували інтегральні рівняння, що описують функції розподілу фононів, що падають на межі зразка та відбиваються від них. Ці рівняння враховують різні механізми відбиття фононів на межах провідника, від дзеркального до повністю дифузного. Вони також узагальнюють рівняння

для потоків балістичних частинок у циліндричних трубках скінченної довжини за умов повного розміщення на стінках, а також рівняння для фононів у циліндричних стрижневих провідниках, наведені в [20 - 24].

Ключове рівняння в запропонованій моделі описує функцію розподілу фононів, що падають на межу в точці, визначеній її просторовою координатою.

$$\Phi_{\text{inc}}(x) = \int_{S_{\text{source}}} F(\mathbf{r}_s, x) d\mathbf{r}_s + \int_0^L dx_1 \int_{S_{\text{edge}}} d\mathbf{r}_e \Phi_{ref}(\mathbf{r}_e) F(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_1) \qquad (42)$$

Величина Φ_{inc} є нормалізованим параметром, який визначає густину потоку частинок у заданій точці на межі провідника з поздовжньою координатою $\boldsymbol{x}$. Вона дорівнює одиниці біля джерела фононів (нагрівач при $\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$) та нулю біля стоку (охолоджувач при $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}$). Для класичних частинок потік визначається тиском і температурою джерела за розподілом Максвелла, тоді як для теплових фононних систем він залежить від температури зразка та описується законом випромінювання чорного тіла Планка.

Перший член у рівнянні (42) описує потік частинок, що надходять у задану точку на бічній поверхні з координатою $\boldsymbol{x}$від усієї площі $\boldsymbol{S}_{\text{source}}$.

Функція F_{12}характеризує потік частинок між двома нескінченно малими елементами поверхні, які можуть випромінювати, поглинати або відбивати, і визначається відомим співвідношенням (42).

$$F_{12} = \frac{1}{\pi} \frac{(\mathbf{n}_1 \mathbf{r}_{12})(\mathbf{n}_2 \mathbf{r}_{21})}{r_{12}^4} = \frac{1}{\pi} \frac{\cos\,\theta_1 \cos\,\theta_2}{r_{12}^2}. \qquad (43)$$

Тут $\mathbf{n}_1$та $\mathbf{n}_2$– одиничні вектори нормалі до відповідних елементів поверхні, а $\mathbf{r}_{12}$– вектор, що з'єднує один елемент поверхні з іншим. Множник πзабезпечує нормалізацію. Це співвідношення описує ізотропний кутовий

розподіл випромінюваних частинок (закон Ламберта), а для відбитих частинок воно відповідає повній акомодації .

Другий член у рівнянні (42) описує потік частинок, що потрапляють у задану точку на бічній поверхні провідника з поздовжньою координатою $\boldsymbol{x}$, від елементів поверхні, розташованих вздовж периметра площі поперечного перерізу провідника з координатою $\boldsymbol{x_1}$. Функція Φ_{ref}описує кутовий та просторовий розподіл фононів, що випромінюються з цієї області поверхні. Інтеграл по S_{edge} береться по межі поперечного перерізу провідника.

Зв'язок між функціями розподілу падаючих та відбитих (або випромінюваних) фононів описується законом відбиття для заданої поверхні, який у цій моделі розглядається як комбінація дзеркального та дифузного відбиття.

Формально функцію розподілу відбитих фононів можна записати як:

$$\Phi_{ref}(\mathbf{k}) = p\Phi_{inc}(\mathbf{k}_{inc}) + (1-p)\int \Phi_{inc}(\mathbf{k}_{inc})\frac{d\mathbf{k}_{inc}}{2\pi} \qquad (44)$$

Тут коефіцієнт p– це так званий параметр дзеркальності поверхні. Він дорівнює одиниці для чисто дзеркального відбиття та нулю для протилежного випадку повністю дифузного відбиття.

Вектор $\mathbf{k}$є одиничним вектором у напрямку відбитого імпульсу фонона, а $\mathbf{k}_{\text{inc}}$ — одиничним вектором імпульсу падаючого фонона. У випадку дзеркального відбиття ці вектори пов'язані класичним законом відбиття (Снелліуса-Френеля) — кут падіння дорівнює куту відбиття відносно нормалі до поверхні або закону збереження тангенціальної складової імпульсу фонона:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{inc}} - 2\mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{k}_{\text{inc}}) \text{ or } \mathbf{k}_{\text{inc}} = \mathbf{k} - 2\mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{k}). \qquad (45)$$

де $\mathbf{n}$— одиничний вектор нормалі на поверхні. Формально отримана система двох рівнянь (42) та (44) для двох невідомих функцій розв'язує задачу

розподілу фононів як функції поздовжньої координати вздовж провідника. У випадку дифузного розсіювання ця система зводиться до інтегрального рівняння для функції розподілу відбитих фононів. Це рівняння вперше було введено Клаузінгом у контексті потоку розрідженого газу через циліндричну трубку скінченної довжини. Зокрема, для циліндричного зразка скінченної довжини Lта діаметра Dрівняння (42) набуває такого вигляду :

$$\Phi(X) = \frac{1}{2}\left\{\frac{1+2X^2}{\sqrt{1+X^2}} - 2X\right\} + \\ + \int_0^{L/d} dX_1 \left\{1 - |X - X_1| \frac{2(X-X_1)^2 + 3}{2(1+(X-X_1)^2)^{3/2}}\right\} \Phi(X_1) \qquad (5)$$

Тут координата xнормована на діаметр циліндричного провідника $X = x/D$. При вивченні теплових потоків квазічастинок теплові резервуари розглядаються як джерела, що підтримують постійну температуру на нагрівачі та охолоджувачі на кінцях зразка [41, 42]. У випадку циліндричних провідників це рівняння було спеціально розглянуто в дослідженні, де було проведено порівняння між числовим методом та запропонованим аналітичним наближеним рішенням.

Для випадку змішаного дзеркально-дифузійного відбиття запропонована система близька до інтегрального рівняння, яке було досліджено в роботах, пов'язаних з потоком фононів у циліндричних провідниках з різним ступенем дифузійного відбиття від бічних стінок. У цих дослідженнях числові методи використовувалися для отримання результатів в обмеженому діапазоні довжин провідників, головним чином через повільну збіжність їх ітераційних підходів.

У цій роботі ми застосовуємо стандартний ітераційний метод [37] та розширюємо його для обробки системи рівнянь. Ключова перевага цього методу полягає в тому, що кожна наступна ітерація являє собою додаткову взаємодію фононів з межею, що дозволяє нам відстежувати як кількість відбиттів фононів, так і відстані їх проходження. Більше того, завдяки своїй

стабільній збіжності, цей метод працює для провідників з будь-яким співвідношенням довжини до діаметра та різними рівнями дифузії відбиття.

Крім того, запропонована система рівнянь полегшує виведення наближеного аналітичного розв'язку задачі. У цьому підході ми пропонуємо використовувати співвідношення, отримане з аналітичної залежності для повністю дифузного випадку, отриманої в посиланнях, та замінити аргумент D/Lспіввідношенням $D/L/(1-p)$, яке дає правильні результати в протилежному граничному випадку:

$$\Lambda(p,W,L) = \Lambda_{\text{Diff}}\left(\frac{\frac{W}{L}}{1-p}\right) \tag{46}$$

Одним із помітних результатів цього підходу є явний вираз для середньої довжини вільного пробігу фононів, який характеризує тепловий потік через циліндричні провідники будь-якого діаметра D, довжини L та коефіцієнта дзеркальності p:

$$\Lambda = \frac{L}{2}\left\{\frac{3\sqrt{d^2+1}}{\sqrt{d^2+1}+1} - \right. \tag{7}$$

$$\left. - \frac{2\left(\sqrt{d^2+1}-d\right)\left(\sqrt{d^2+1}+1\right)-1}{1+\sqrt{d^2+1}+2d\sqrt{d^2+1}\left\{(d+2)\sqrt{d^2+1}+(d^2+2)\right\}/(4d^2+d+4)}\right\} \#(7)$$

Отриманий вираз узагальнює відомі формули для коефіцієнтів теплопровідності довгих провідників на випадки зі скінченними довжинами, а також встановлює межі застосовності цих формул. Наприклад, у межі повної дифузії $p = 0$ та великих довжин $d \ll 1$, цей результат дає вираз для середньої довжини вільного пробігу $\Lambda = 7D/4$, який суттєво відрізняється від відповідного результату, $\Lambda \approx D$.

3.6. Результати чисельних розрахунків

Наведемо результати чисельних розрахунків за системою інтегральних рівнянь для різних розмірів провідників та різних величин параметру дзеркальності поверхні провідника

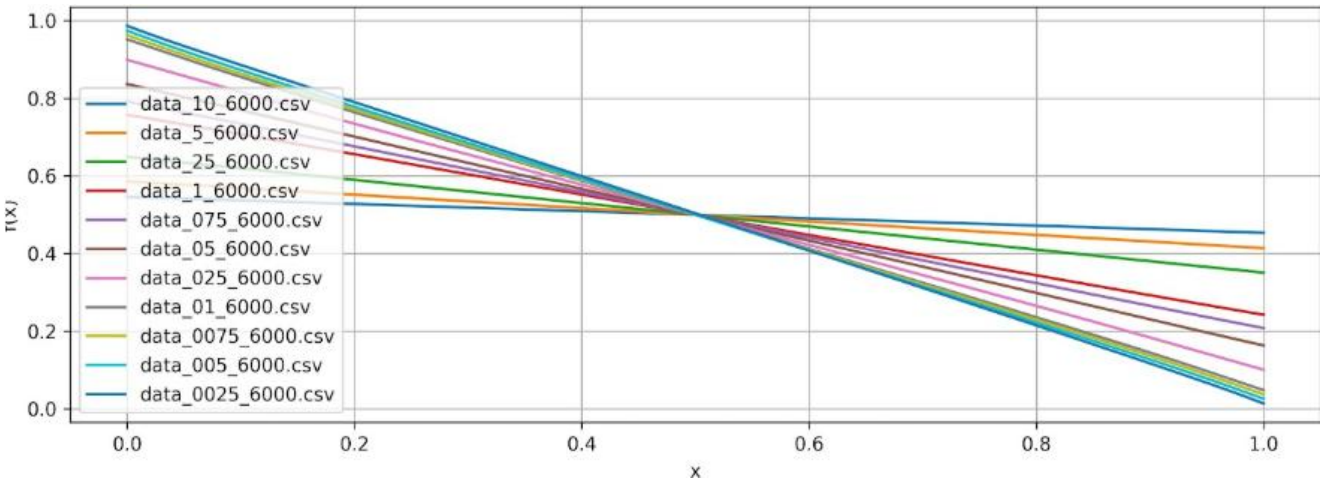
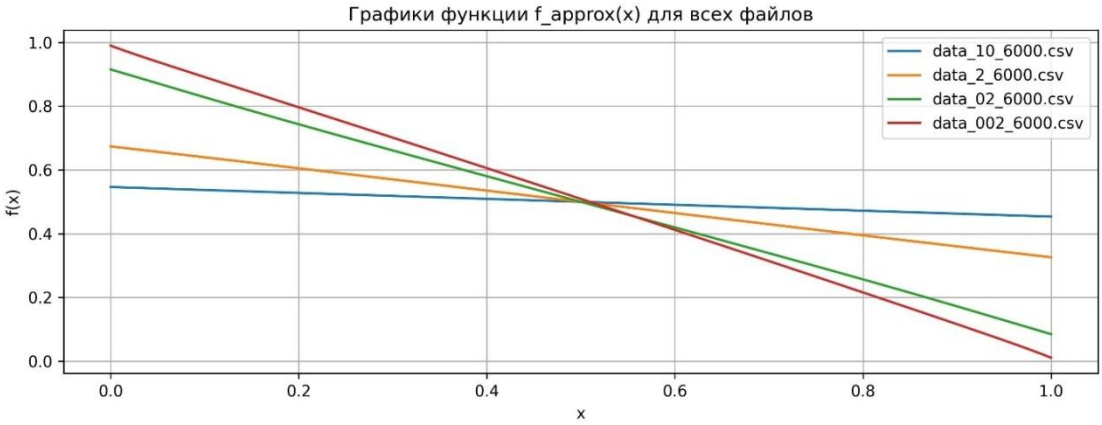


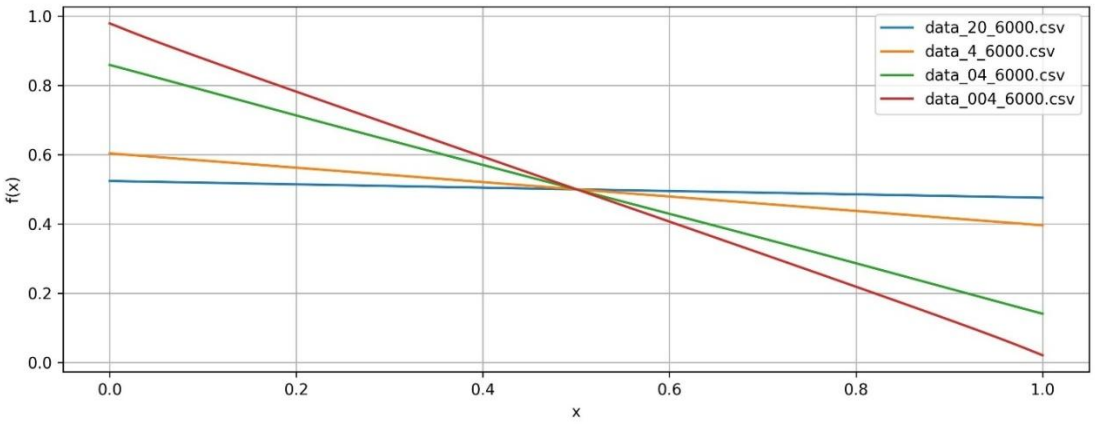
Рис. 7. Профіль потоку енергії в циліндричних провідниках для певних відношень діаметра до довжини, вказаних на рисунку для випадку чисто дифузного розсіювання

На Рис. 7 наведено профілі потоку енергії в циліндричних провідниках для певних відношень діаметра до довжини, для випадку чисто дифузного розсіювання коли коефіцієнт дзеркальності $p = 0$.

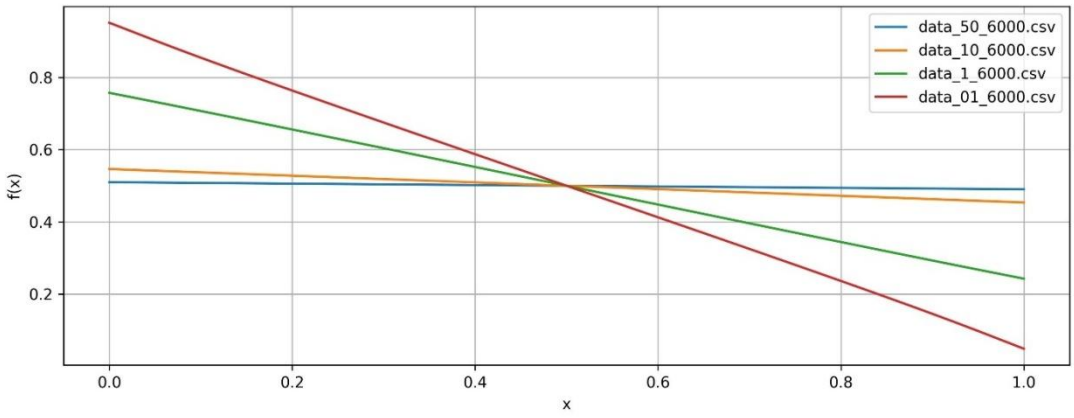
На наступному Рис. 8 наведені результати чисельних розрахунків профілю температури для різних значень цього параметру дзеркальності. Зокрема, результати розрахунків для величини $p = 0.5$ наведені на Рис. 8а, для величини $p = 0.75$ – на Рис. 8б, для величини $p = 0.9$ – на Рис. 8в, а для величини $p = 0.95$ – на Рис. 8г. Обчислення проводились для чотирьох значень відношення діаметру провідника до його довжини D/L = 0.01 (червона лінія), D/L = 0.1 (зелена лінія), D/L = 1 (оранжева лінія), та D/L = 10 (блакитна лінія).



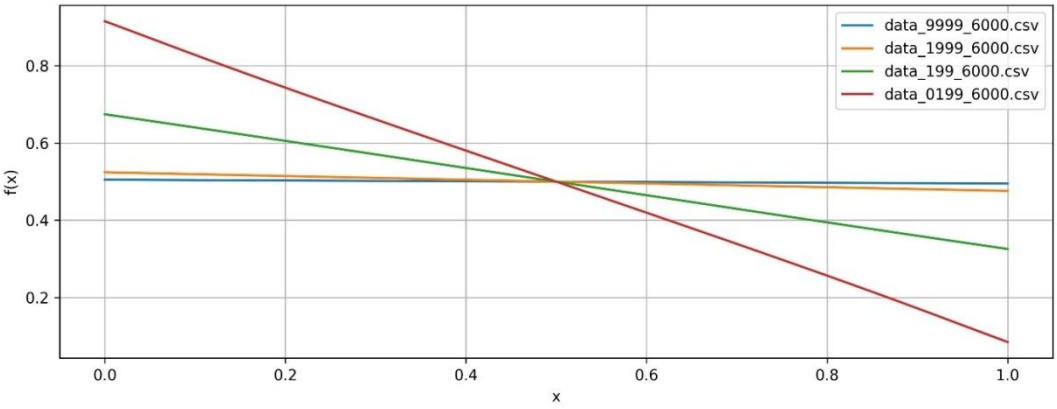
а)



б)



в)



г)

Рис.8. Профіль температури для різних відношень діаметра до довжини, та різних величин параметру дзеркальності.

Отримані в результаті чисельного моделювання температурні профілі вздовж довжини провідника дають змогу з високою точністю обчислити тепловий потік, що проходить крізь матеріал. Це, у свою чергу, дозволяє остаточно визначити ефективний коефіцієнт теплопровідності для провідників із довільним співвідношенням геометричних параметрів — довжини та діаметру — а також для будь-якого значення коефіцієнта дзеркального відбиття теплових носіїв на межі провідника.

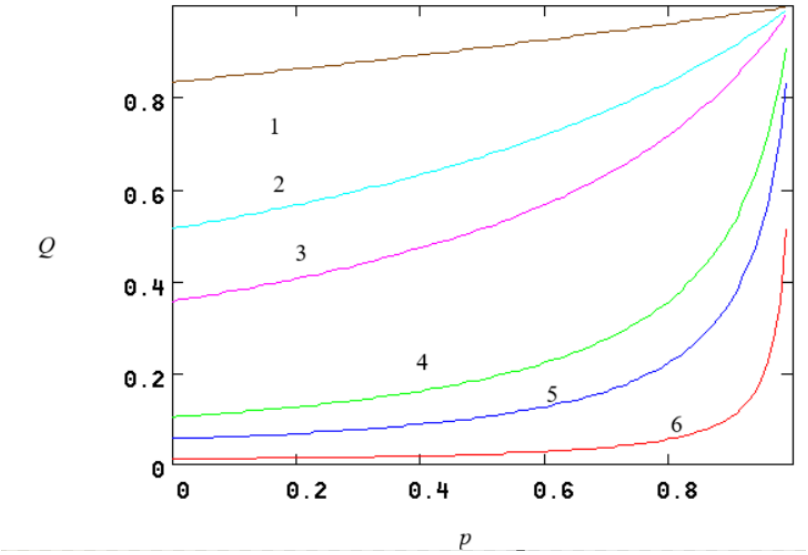


Рис. 9. Залежність потоку тепла від величини коефіцієнта дзеркального відбиття p для провідників із довільним співвідношенням геометричних параметрів — діаметру D до довжини L. Лінія 1 відповідає відношенню $D/L = 5$, 2 – $D/L = 1$, 3 – $D/L = 0{,}5$, 4 – $D/L = 0.1$, 5 – $D/L = 0.05$, і лінія 6 – $D/L = 0.01$.

Розрахунок теплового потоку ґрунтується на використанні аналітичного виразу (35), в якому безпосередньо використовується профіль температурного розподілу, отриманий на попередньому етапі чисельного аналізу. Такий підхід забезпечує універсальність методу, дозволяючи адаптувати його до широкого класу задач, пов’язаних із дослідженням теплопереносу в умовах, де суттєву роль відіграють як розмірні ефекти, так і характер взаємодії носіїв тепла з поверхнею.

3.7.Висновки до розділу

У цій розділі ми дослідили особливості теплопереносу в циліндричних діелектричних провідниках у балістичному режимі поширення фононів за умови довільного відбиття фононів від бічних стінок. У такому режимі необхідною умовою є те, щоб довжина хвилі фононів була значно меншою за характерний розмір провідника — його діаметр. Саме тому запропонована модель може бути непридатною для наднизьких температур або надтонких нанодротів.

У межах запропонованого підходу було розв’язано систему інтегральних рівняннь, які описують потік енергії фононів у визначених точках на поверхні провідника. Ці рівняння було проаналізовано як чисельно, так і з використанням наближеної аналітичної формули. Отримане розв’язання дозволило вивести явні вирази для теплового потоку вздовж провідника у випадку, коли різниця температур прикладена до його торців, незалежно від співвідношення між діаметром і довжиною провідника.

Отримані результати істотно відрізняються від класичних формул, відомих для режиму Кнудсена в розрідженому газі та моделі Казиміра для фононного теплопереносу в циліндричних структурах. Основними фізичними відмінностями є: по-перше, у згаданих моделях температурний градієнт прикладається вздовж бічної поверхні, тоді як у нашій роботі – лише на торцях; по-друге, у класичних моделях розглядається нескінченно довгий провідник. Якщо ж у нашій загальній формулі врахувати ці два обмеження, то вона переходить у добре відомий результат для режиму Кнудсена в розрідженому газі. Таким чином, запропоноване нами розв’язання є узагальненням класичних формул для випадку скінченної довжини провідника.

ВИСНОВКИ

У дипломній роботі зроблено огляд літератури, аналітичних і чисельних підходів до моделювання теплопереносу в циліндричних діелектричних провідниках у балістичному режимі. Проаналізовано залежність коефіцієнта теплопровідності від геометричних параметрів провідника та характеру відбиття фононів на бічних стінках.

Сформульовано та досліджено систему рівнянь, що описує розподіл фононного потоку вздовж довжини провідника з урахуванням дзеркального та дифузного відбиття. Показано, що розв’язання цієї задачі можливе як аналітично в наближеній формі, так і чисельно за допомогою ітераційного методу, який узагальнено на випадок системи рівнянь.

Отримані результати дозволяють краще зрозуміти природу теплового транспорту в нанорозмірних системах і можуть бути використані для прогнозування теплопровідності наноструктур з довільними розмірами та ступенем шорсткості поверхонь. Зокрема, було доведено, що у випадку значного дифузного розсіювання вплив бічних поверхонь істотно знижує ефективну теплопровідність, що є важливим для термоменеджменту у нанопристроях.

Таким чином, робота сприяє подальшому розвитку методів моделювання балістичного теплопереносу та має потенціал для практичного застосування у сфері нанотехнологій, мікроелектроніки та термоелектрики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, and S. R. Phillpot, “Nanoscale thermal transport,”J. Appl. Phys. 93, 793–818 (2003).
2. A. Shakouri, “Recent developments in semiconductor thermoelectricphysics and materials,” Annu. Rev. Mater. Res. 41, 399–431 (2011).
3. T. M. Tritt, “Thermoelectric phenomena, materials, and applications,” Annu. Rev. Mater. Res. 41, 433–448 (2011).
4. D. L. Medlin and G. J. Snyder, “Interfaces in bulk thermoelectric materials,” Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 14, 226–235 (2009).
5. C. J. Vineis, A. Shakouri, A. Majumdar, and M. G. Kanatzidis,“Nanostructured thermoelectrics: Big efficiency gains from smallfeatures,” Adv. Mater. 22, 3970–3980 (2010).
6. M. G. Kanatzidis, “Nanostructured thermoelectrics: The new paradigm?” Chem. Mater. 22, 648–659 (2010).
7. E. S. Toberer, L. L. Baranowski, and C. Dames, “Advances in thermal conductivity,” Annu. Rev. Mater. Res. 42, 179–209 (2012).
8. A. A. Balandin, “Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials,” Nature Mater. 10, 569–581 (2011).
9. M. M. Sadeghi, M. T. Pettes, and L. Shi, “Thermal transport in graphene,” Solid State Commun. 152, 1321–1330 (2012).
10. N. Li, J. Ren, L. Wang, G. Zhang, P. H€anggi, and B. Li, “Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond,” Rev. Mod. Phys. 84, 1045–1066 (2012).
11. A. Weathers and L. Shi, “Thermal transport measurement techniques for nanowires and nanotubes,” Annu. Rev. Heat Transfer 15, 101–134 (2013).
12. G. Chen, Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons (Oxford University Press, 2005).

13. Z. Zhang, Nano/Microscale Heat Transfer (McGraw–Hill Professional, 2007).
14. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, “Direct calculation of the tunneling current,” J. Phys. C 4, 916 (1971).
15. R. Prasher, “Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts,” Appl. Phys. Lett. 94, 041905 (2009).
16. E. English, J. Duda, J. Smoyer, D. Jordan, P. Norris, and L. Zhigilei, “Enhancing and tuning phonon transport at vibrationally mismatched solid-solid interfaces,” Phys. Rev. B 85, 035438 (2012).
17. R. Stevens, L. Zhigilei, and P. Norris, “Effects of temperature and disorder on thermal boundary conductance at solid–solid interfaces: Nonequilibrium molecular dynamics simulations,” Int. J. Heat Mass Transfer 50, 3977–3989 (2007).
18. M. Hu, J. Goicochea, B. Michel, and D. Poulikakos, “Water nanoconfinement induced thermal enhancement at hydrophilic quartz interfaces,”Nano Lett. 10, 279–285 (2010).
19. M. Hu, X. Zhang, D. Poulikakos, and C. Grigoropoulos, “Large near junction thermal resistance reduction in electronics by interface nanoengineering,” Int. J. Heat Mass Transfer 54, 5183–5191 (2011).
20. K. Termentzidis, P. Chantrenne, and P. Keblinski, “Nonequilibrium molecular dynamics simulation of the in-plane thermal conductivity of superlattices with rough interfaces,” Phys. Rev. B 79, 214307 (2009).
21. P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P. McEuen, “Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes,” Phys. Rev. Lett. 87, 215502 (2001).
22. A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, “Superior thermal conductivity of single–layer graphene,” Nano Lett. 8, 902–907 (2008).

23. R. M. Costescu, D. G. Cahill, F. H. Fabreguette, Z. A. Sechrist, and S. M. George, “Ultra-low thermal conductivity in W/Al2O3 nanolaminates,” Science 303, 989–990 (2004).
24. Y. S. Ju, M.-T. Hung, and T. Usui, “Nanoscale heat conduction across metal-dielectric interfaces,” J. Heat Transfer 128, 919–925 (2006).
25. Z. J. Li, S. Tan, E. Bozorg-Grayeli, T. Kodama, M. Asheghi, G. Delgado, M. Panzer, A. Pokrovsky, D. Wack, and K. E. Goodson, “Phonon dominated heat conduction normal to Mo/Si multilayers with period below 10 nm,” Nano Lett. 12, 3121–3126 (2012).
26. Y. Jin, A. Yadav, K. Sun, H. Sun, K. P. Pipe, and M. Shtein, “Thermal boundary resistance of copper phthalocyanine-metal interface,” Appl. Phys. Lett. 98, 093305 (2011).
27. Y. Jin, C. Shao, J. Kieffer, K. P. Pipe, and M. Shtein, “Origins of thermal boundary conductance of interfaces involving organic semiconductors,”J. Appl. Phys. 112, 093503 (2012).
28. A. Majumdar and P. Reddy, “Role of electronphonon coupling in thermal conductance of metalnonmetal interfaces,” Appl. Phys. Lett. 84, 4768 (2004).
29. J. Ordonez-Miranda, J. J. Alvarado-Gil, and R. Yang, “The effect of the electron-phonon coupling on the effective thermal conductivity of metalnonmetal multilayers,” J. Appl. Phys. 109, 094310 (2011).
30. W. Wang and D. G. Cahill, “Limits to thermal transport in nanoscale metal bilayers due to weak electron-phonon coupling in Au and Cu,” Phys. Rev. Lett. 109, 175503 (2012).
31.. Birch, W. R. G. Kemp, P. G. Klemens, and R. J. Tainsh, “The lattice thermal conductivity of some gold alloys,” Aust. J. Phys. 12, 455 (1959).
32. C. Chiritescu, D. G. Cahill, N. Nguyen, D. Johnson, A. Bodapati, P. Keblinski, and P. Zschack, “Ultralow thermal conductivity in disordered, layered WSe2 crystals,” Science 315, 351–353 (2007).

33. Knudsen M., Kinetic Theory of Gases, 1934. Knudsen, M. (1909) Die Gesetze der Molekularstromung und der inneren Reibungsstromung der Gase durch Rohren. Annalen der Physik, 28, 75-130. http://dx.doi.org/10.1002/andp.19093330106
34. H. B. G. Casimir, Note on the Conduction of Heat in Crysals, Physica V, 495 (1938). http://dx.doi.org/10.1016/S0031-8914(38)80162-2
35. P. Clausing, “ ¨Uber die str¨omung sehr verd¨unnter gase durch r¨ohren von beliebiger l¨ange”, Annalen der Physik 404, 961–989 (1932) https://doi.org/10.1002/andp.19324040804
36. T. Klitsner, J. E. VanCleve, H. E. Fischer, and R. O. Pohl, Phonon Radiative Heat Transfer and Surface Scattering, Phys. Rev. B 38, 7576 (1988). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.7576
37. M. Perlmutter, R. Siegel, J. Heat Transfer, 85, 55-62 (1963). https://doi.org/10.1115/1.3686010.
38. J.Amrit, K. Nemchenko, T.Vikhtinskaya, J. Appl. Phys. 129, 085105(2021). https://doi.org/10.1063/5.0036935.
39. Radiation Heat Transfer, Augmented Edition Paperback by E. M. Sparrow Routledge; 1st edition, 1978, 380 p.
40. Radiative Heat Transfer. by M.M.Modest, Elsevier, 3d edition, 2013, p. 865.
41. Polyanin, P., & Manzhirov, A.V. (2008). Handbook of Integral Equations: Second Edition (2nd ed.). Chapman and Hall/CRC.
42. J. Amrit, Ye. Nemchenko, K. Nemchenko, I. Kudryavtsev, S. Rogova, M. Spotar, T. Vikhtinskaya; *Low Temp. Phys.* 2024; 50 (5): 364–367.
43. J. Amrit, T. Medintseva, Ye. Nemchenko, K. Nemchenko, M. Spotar, S. Rogova, T. Vikhtinskaya; *Low Temp. Phys.* 2023; 49 (8): 961 – 966.