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

Кафедра інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до дипломної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем бакалавр

«Нові моделі теплопровідності нанорозмірних структур»

Виконала: студентка 4 курсу, групи НФ-43
Медінцева Т.В.
спеціальність:
105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма:
Прикладна фізика енергетичних систем
Керівник: д.ф.-м.н., професор Нємченко К.Е.

Рецензент:

Харків – 2020

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики
Кафедра інформаційних технологій у фізико-енергетичних системах
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) бакалавр
Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Руслан СУХОВ
підпис
"____"_____2020 року

З А В Д А Н Н Я

НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ

Медінцева Тетяна Володимирівна

1.Тема роботи «Нові моделі теплопровідності нанорозмірних структур» керівник роботи: Нємченко Костянтин Едуардович, доктор фізико-математичних наук. Затверджено наказом по університету від 5 грудня 2020 року № 0210–05/2249.

2. Строк подання студентом роботи 06.06.2020

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

1) дослідити основні механізми теплопровідності фононних систем в твердих тілах малої розмірності;

2) вивчити існуючі механізми взаємодії фононів з границями зразків та їх вплив на теплопровідність тіл;

3) розробити модель перенесення тепла фононами в двовимірних структурах у балістичному режимі;

4) розглянути низку режимів взаємодії фононів з границями в двовимірних зразках та отримати явні вирази для коефіцієнту теплопровідності в цих режимах;

5) запропонувати умови для проведення нових експериментів для перевірки моделей, які запропоновано у дипломній роботі.

4. План роботи

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

5.Дата видачі завдання

Студент _____ Тетяна МЕДІНЦЕВА

підпис

Керівник роботи _____ Костянтин НЄМЧЕНКО

підпис

РЕФЕРАТ

Тетяна Медінцева «Нові моделі теплопровідності нанорозмірних структур» Кваліфікаційна робота бакалавра з прикладної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н.Каразіна, 2020. – 47 с.

В роботі розв’язується задача про теплопровідності двовимірних наноструктур – нанострічках – в області температур, коли взаємодією фононів між собою можна знехтувати. У цьому, балістичному, режимі, потоки тепла можна обмежити лише взаємодією фононів з границями зразків. В роботі вивчено існуючі механізми взаємодії фононів з границями зразків та їх вплив на теплопровідність тіл. Розроблено модель перенесення тепла фононами в двовимірних структурах у балістичному режимі. Розглянуто низку режимів взаємодії фононів з границями в двовимірних зразках та отримати явні вирази для коефіцієнту теплопровідності в цих режимах. Отримано інтерполяційні співвідношення, які узагальнюють існуючі вираження для коефіцієнта теплопровідності в разі дзеркального і дифузного віддзеркалення від стінок. Запропоновано умови для проведення нових експериментів для перевірки моделей, які запропоновано у дипломній роботі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ФОНОНИ, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, НАНОСТРІЧКИ, БАЛІСТИЧНИЙ РЕЖИМ, ЗЕРКАЛЬНЕ ВІДБИТТЯ, ДІФУЗНЕ ВІДБИТТЯ.

РЕФЕРАТ

Татьяна Мединцева «Новые модели теплопроводности нанорозмерных структур»

Квалификационная работа бакалавра прикладной физики. – Х.: Харьковский национальный университет имени В. Н.Каразина, 2020. – 47с.

В работе решается задача о теплопроводности двумерных наноструктур – нанолентах – в области температур, когда взаимодействием фононов между собой можно пренебречь. В этом, баллистическом, режиме потоки тепла могут быть ограничены только взаимодействием фононов с границами тел. В работе изучено существующие механизмы взаимодействия фононов с границами образцов и их влияние на теплопроводность тел. Разработана модель переноса тепла фононами в двумерных структурах в баллистическом режиме. Рассмотрен ряд режимов взаимодействия фононов с границами в двумерных образцах и получить явные выражения для коэффициента теплопроводности в этих режимах. Получены интерполяционные соотношения, которые обобщают существующие выражение для коэффициента теплопроводности при зеркальном и диффузном отражениях от стенок. Рассмотрены условия для проведения новых экспериментов для проверки моделей, предложенных в дипломной работе.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ФОНОНЫ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ, НАНОЛЕНТЫ, БАЛЛИСТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ, ЗЕРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ, ДИФУЗНОЕ ОТРАЖЕНИЕ.

ABSTRACT

Tatiana Medintseva "New models of thermal conductivity of nanoscale structures" Qualification work of the bachelor of applied physics. – Kharkiv. – V. N. Karazin Kharkiv National University, 2020. – 47 p.

In this work, we solve the problem of the thermal conductivity of two-dimensional nanostructures — nanoribbons — in the temperature range when the interaction of phonons between themselves can be neglected. In this ballistic mode, heat fluxes can be limited only by the interaction of phonons with the boundaries of bodies. In the work, the existing mechanisms of the interaction of phonons with the boundaries of samples and their influence on the thermal conductivity of bodies are studied. A model of heat transfer by phonons in two-dimensional structures in a ballistic mode is developed. A number of modes for the interaction of phonons with boundaries in two-dimensional samples are considered and explicit expressions for the thermal conductivity coefficient in these modes are obtained. Interpolated relations are obtained that generalize the existing expressions for the coefficient of thermal conductivity at specular and diffuse reflections from the boundaries. The conditions for new experiments to test the models proposed are considered in the thesis.

KEYWORDS: PHONONES, THERMAL CONDUCTIVITY, NANO-RIBBONS, BALLISTIC MODE, SPECULAR REFLECTION, DIFFUSIVE REFLECTION.

ЗМІСТ

ВСТУП 8
1. ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВСТІ НАНОСТРУКТУР (ОГЛЯД) 10
1.1. Наноструктури та наноматеріали 10
1.2. Тепловий перенос у наноструктурах 12
1.3. Огляд сучасних досліджень 14
1.4. Застосування наноструктур 18
1.5. Висновки до розділу 18
2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ ФОНОННИХ СИСТЕМ В БАЛИСТИЧНОМУ РЕЖИМІ 20
2.1. Ефект Кнудсена 20
2.2. Проблема випромінювання абсолютно чорного тіла 22
2.3. Випромінювання абсолютно чорного тіла 24
2.4. Фононна радіаційна передача тепла 27
2.5. Постановка проблеми 29
3. ФОНОННА ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ ДВОВИМІРНИХ НАНОСТРУКТУР. 31
3.1. Абсолютно поглинаюча межа 31
3.2. Абсолютно дзеркальна межа 35
3.3. Кінцеве значення віддзеркалень (відображень) 37
3.4. Приклад поглинання на кордоні 38
3.5. Приклад поглинання у зразку 41
ВИСНОВКИ 45
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ 46

ВСТУП

Актуальність теми. Протягом останніх двох десятиліть бурхливий розвиток у синтезі та переробці нанорозмірних матеріалів створив великий попит на розуміння теплового транспорту низькорозмірних наноматеріалів.

В останні роки технологічні розробки зазнали суттєвого уповільнення, головним чином через необхідність вирішення проблеми з нагріванням: наприклад, екстремальна мініатюризація електронних пристроїв неминуче призводить до локального перегріву та розсіювання (наприклад, у центральному процесорному блоці), що шкодить продуктивності та терміну експлуатації пристрою. Для того, щоб забезпечити подальшу мініатюризацію, важливо мати можливість відводити зайве тепло, і тому йде пошук нових матеріалів з підвищеною теплопровідністю. З іншого боку, всюди наявність тепла у використанні технологій вимагає ефективного способу його переробки та перетворення на корисний джерело енергії. Цього можна досягти за рахунок термоелектричного перетворення, ефективність якого залежить від здатності матеріалів підтримувати постійний градієнт температури, а отже, і їх хорошої теплоізоляції. Таким чином, розробка засобів контролю теплопередачі, напряму її поширення та ефективності лежить в основі сучасних досліджень в галузі теплотехніки, а також мікротехнологій.

Теплопередача насправді тісно пов'язана із поширенням звуку (акустичним переносом) у матеріалах, так як в ізоляторах та напівпровідниках основними теплоносіями є акустичні фонони. Специфічна динаміка фононів буде безпосередньо впливати на тепловий транспорт, з двома різними внесками: пропагандистський, який залежить від середнього вільного шляху фонону, теплоємність, швидкість і щільність коливань станів, і дифузійний, що включає фонон дифузивність, а не середній вільний шлях і швидкість

Для досягнення поставленої мети визначені **задачі**:

Дослідити основні механізми теплопровідності фононних систем в твердих тілах малої розмірності; вивчити існуючі механізми взаємодії фононів з границями зразків та їх вплив на теплопровідність тіл; розробити модель

перенесення тепла фононами в двовимірних структурах у балістичному режимі; розглянути низку режимів взаємодії фононів з границями в двовимірних зразках та отримати явні вирази для коефіцієнту теплопровідності в цих режимах; запропонувати умови для проведення нових експериментів для перевірки моделей, які запропоновано у дипломній роботі.

Об’єкт дослідження – перенесення тепла в наноматеріалах

Предмет дослідження – механізми взаємодії фононів з границями двовимірних зразків та їх вплив на теплопровідність тіл

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

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

Практичне значення отриманих результатів:

– запропоновані аналітичні формули дозволять передбачати значення коефіцієнтів різних двовимірних структур при їх проектуванні.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 47 сторінок, із них основного тексту 35 сторінок, 9 рисунків за текстом, список використаних джерел із 18 найменувань на 2 сторінках.

1. ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВСТІ НАНОСТРУКТУР (ОГЛЯД)

1.1. Наноструктури та наноматеріали

Нанотехнологія дозволяє реалізувати нові матеріали та пристрої з базовою структурною одиницею в інтервалі 1–100 нм і характеризується набуттям контролю на атомному, молекулярному та надмолекулярному рівні. Зменшення розмірів матеріалу в нанорозмірному діапазоні зазвичай призводить до зміни його фізіохімічних властивостей, таких як реакційна здатність, кристалічність та розчинність[15].

Існує велика різноманітність наноструктур, таких як наночастинки, нанопори, нанострижні, нанопровідники, нанотрубки, нанотрубки та наноґратки. Найперспективнішими особливостями цих структур є їх залежні від розміру властивості. Наприклад, металеві наночастинки демонструють регульоване випромінювання та довжину хвилі поглинання залежно від їх співвідношення сторін та покриття. Ці унікальні властивості приписуються явищу, що називається локалізованим резонансом поверхневого плазмону. Кожна частинка може ефективно продукувати фотолюмінесценцію, що еквівалентно мільйону молекул барвника. Крім того, вони фотостабільні і не страждають від фотознебарвлення. Завдяки своїм кращим оптичним властивостям вони можуть видавати кращий сигнал над звичайними молекулами барвника. Після покриття молекулами зонда оптичні властивості наноструктур дозволяють виявити конкретні молекули-мішені[7].

Відомо, що деякі наноструктуровані поверхні придатні для посилення адгезії клітин та проліферації. Вважається, що це походить від наслідування фактичних нано-особливостей живих систем. Вуглецеві нанотрубки мають надзвичайно високу здатність до струму. Вони можуть бути використані для з'єднання пристроїв на дуже низьких розмірах, коли звичайні метали страждають від високої контактної стійкості та електроміграції. Електроміграція обмежує використання в наномасштабі найбільш широко

використовуваних взаємозв’язаних металів, міді. Повідомляється, що нанопроводи є корисними в різних техніках зондування, включаючи електричні, електрохімічні, оптичні та масові підходи. Зазвичай нанопровідники демонструють високу стійкість через поверхневого розсіювання носіїв, але їх стійкість сильно залежить від видів, прикріплених до поверхні. Якщо іммобілізований вид може вибірково зв'язуватися з мішенню, то він може виявити наднизьку концентрацію цільових видів.

В останні кілька років, завдяки поєднанню їх об'ємних та поверхневих властивостей із загальною поведінкою, наноматеріали набувають все більшого значення для реалізації нових інструментів тканинної інженерії[15].

З розвитком технологій стало можливим синтезувати та характеризувати певні нові види матеріалів, що мають дуже малі габарити та нові характеристики. Наноматеріали виготовляються шляхом регулярного розміщення атома в масштабі нанометрів. Це спричинило появу деяких спеціальних матеріалів, таких як фулерени, вуглецеві нанотрубки, нанопористі матеріали, дендримери, аерогелі, цеоліти, структура серцевини та оболонки тощо[18].

Синтезувати частинки розмірів нанометрів з вузьким розподілом за розмірами та чистотою є великим випробуванням. Для отримання наноструктурованого матеріалу застосовуються різноманітні методи. В принципі, будь-який спосіб, здатний отримувати полікристалічний матеріал дуже дрібного зерна, може бути використаний для отримання нанокристалічних матеріалів. В даний час існує два підходи: зменшення розміру, також відомий як підхід зверху вниз, і нарощування шляхом самостійного складання або підходу знизу вгору для отримання нанорозмірних матеріалів. У процесі зверху вниз більші матеріали зводяться до менших розмірів порядку нанометрів, а при підході знизу вгору матеріали складаються до розміру нанометра. Загальновживані методи можна класифікувати як фізичні та хімічні методи.

Яким би не був метод синтезу наночастинок, важливо уникати злиття частинок у більші частинки та досягнення монодисперсності та хімічної стійкості протягом тривалого періоду. Тому шляхи синтезу, які захищають або пасивують частинки, стали привабливими порівняно з тими, які не дбають про довгострокову стабільність або монодисперсність.

1.2. Тепловий перенос у наноструктурах

Протягом останніх двох десятиліть бурхливий розвиток у синтезі та переробці нанорозмірних матеріалів створив великий попит на розуміння теплового транспорту низькомірних наноматеріалів. Наноструктури включають: одновимірні (1D) структури, як нанотрубки (NT) і нанопроводи (NW); двовимірна (2D) кристалічна ґратка з площинними листками лише товщиною одного атома, як графени; і тонкі плівки, що складаються з чергуються шарів з двох різних матеріалів, надґраток.

Наноструктури з високою теплопровідністю можуть застосовуватися в тепловіддачі. Для прискорення застосування наноструктури в тепловому управлінні необхідне всебічне дослідження, що поєднує теоретичне моделювання, обчислювальне моделювання та експериментальні дослідження[12,13].

Окрім великого інтересу до застосувань, існує також потреба в розумінні теплопровідності в маломірних системах. Теплопровідність – одне з найважливіших фундаментальних фізичних явищ у природі. Традиційно вважається, що тепловий потік через гомогенний матеріал слідує закону Фур'є, який говорить, що тепловий потік пропорційний градієнту температури вздовж шляху теплового потоку, як $J = -\kappa \cdot \nabla T$, де κ – теплопровідність. Для сипучого матеріалу теплопровідність вважається інтенсивним властивістю, яке повинно бути незалежним від розміру та геометрії, як і інші властивості матеріалу, такі як щільність, питома теплоємність та електропровідність. Закон Фур'є був підтверджений в останні двісті років сипучими матеріалами (тривимірні макроскопічні системи).

Однак в останні кілька десятиліть було встановлено, що закон Фур'є був порушений в ґратках з низькими розмірами[14]. Було встановлено, що теплопровідність ланцюгів, подібних до Фермі-Паста-Улам (ФПУ), розходилася з розміром системи L, як $\kappa \propto L^{\beta}$. Повідомлене значення β коливається від 0,33 до 0,44. Досі існують видатні дискусії щодо універсального значення показника β. Ван і Лі встановили, що β дорівнює 1/3 при проміжному з'єднанні і дорівнює 2/5 при низькій температурі та слабкій муфті в 1D-ґратці. Вони також припускають, що β дорівнює 1/3, коли відбувається з'єднання між поздовжнім і поперечним режимами. Таким чином, наноматеріали є дуже перспективною платформою для перевірки фундаментальної теорії теплового транспорту в маломірних системах.

В останні роки були розроблені деякі теорії для опису транспорту тепла в наноматеріалах. Для дослідження нанорозмірного теплового переносу використовувались різні імітаційні підходи, такі як молекулярна динаміка, Монте-Карло, динаміка гартки, нерівноважна функція Гріна, кінетичне рівняння Больцмана тощо. Крім того, як прогреси у галузі мікро- та нанотехнологій повідомляється про все більше експериментальних вимірювань теплових властивостей наноматеріалів. Поєднання теоретичних, моделюючих та експериментальних досліджень безумовно прискорить наше розуміння теплопровідності в нанорозмірному масштабі[1,16].

Нещодавня потреба у видобутку відновлюваної енергії за допомогою термоелектричних пристроїв та твердотільних охолоджувачів Пельтьє, що використовуються в інформаційно-комунікаційних технологіях, викликала інтерес до розуміння ролі ґраткового теплового переносу в наноструктурах та наноструктурованих матеріалах. Наноструктурні напівпровідники запропоновані як спосіб поліпшити термоелектричну величину достовірності (ZT), або за рахунок поліпшення електронного коефіцієнта потужності в чисельнику ZT, або за рахунок зниження теплопровідності на знаменнику, в ідеалі досягнення матеріалу, який веде себе як електронний кристал і фононне скло. Насправді, контроль теплопровідності на основі фононової інженерії на

Землі з великою кількістю дешевих матеріалів, таких як кремній, вже показав перспективний шлях до життєздатних термоелектричних пристроїв (ТЕ) з хорошими показниками. Детальне розуміння фононових дисперсійних зв'язків та розсіювання фононів у маломірних наноструктурах може привести нас до проектування матеріалів та пристроїв з урахуванням акустичних та теплових властивостей[8,17].

1.3. Огляд сучасних досліджень

Бісмарк і де Хаас провели ряд експериментів в період між 1935 і 1938 роках, в ході яких виявили, що при низьких температурах (близько 10К і нижче) теплопровідність високоякісних діелектричних кристалів знаходить залежність від розмірів зразка. Пейерс допускав, що такий ефект може бути пов'язаний з "відображенням пружних хвиль від стінок стрижня". Надалі ця ідея була доопрацьована Казимиром[6]. При низьких температурах важливі лише акустичні фонони довгих хвиль. У 1938 році Казимир показав, що провідність можна записати як

$$\kappa = \frac{1}{3} C \langle v \rangle \Lambda_C, \tag{1.1}$$

де C – теплоємність, а v – відповідна середня швидкість фонону. Для випадку, коли швидкість звуку є ізотропною і не залежить від частоти фонону, вона задається значенням

$$\langle v \rangle = \frac{\frac{1}{v_l^2} + \frac{1}{v_t^2}}{\frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3}}, \tag{1.2}$$

де v_l і v_t є поздовжніми і поперечними швидкостями фононів відповідно. Казимир виявив, що ефективним середній вільний шлях для циліндричного стрижня радіусом R буде

$$\Lambda_C = 2R, \tag{1.3}$$

Для стрижня квадратного перерізу зі стороною D результатом є

$$\Lambda_C = \frac{D}{2}\left[3\ln\left(1+\sqrt{2}\right) - \sqrt{2} + 1\right] \approx 1.115D, \qquad (1.4)$$

Зауважимо, що рівняння (1.3) та (1.4) ґрунтуються на припущенні, що розсіювання на поверхні зразка ідеальним, тобто після попадання на поверхню зразка фонон відбивається у випадковому напрямку.

Рівняння (1.3) та (1.4) мають місце, коли швидкість розсіювання фононів через фононно-фононні взаємодії та розсіювання фононів за дефектами настільки мале, що фонони можуть пересуватися по ширині зразка без розсіювання. Для наноструктур, на відміну від макроскопічних зразків, для котрих ця ситуація виникає тільки при низьких температурах, важливим є розсіяння меж при набагато більш високих температурах. Для досить малих зразків провідність буде залежати від розмірів навіть при кімнатній температурі. Можна зробити приблизну оцінку необхідного для цього розміру.

Наприклад, якщо для кремнію взяти швидкість Дебая (5700 м/с) за середню швидкість фонону, то кінетична формула передбачає середній вільний шлях у об'ємному зразку при кімнатній температурі 47 нм. Таким чином, розміри повинні бути меншими за цей, щоб система знаходилася в режимі Казимира.

Цей ефект був досліджений експериментально для різних наноструктурних зразків. Можлива наявність дефектів усередні матеріалу та недосконале знання деталей поверхні зразка ускладнює експериментальну роботу. Більшість теоретичних робіт використовують рівняння фонона Больцмана з деяким наближенням до терміну зіткнення. Наприклад, хоча це насправді правильно лише для частот, значно менших від частоти Дебая, розсіювання фононів ізотопами часто вважається прямо пропорційним четвертої потужності фононної частоти. У більшості випадків дисперсійне відношення прийняте за спрощена форму для фонону. Однак при кількісному обчисленні провідності необхідно враховувати деталі відношення фононної

дисперсії та ефекти фокусування фонону. Розрахунки також проводилися із застосуванням молекулярної динаміки, яка може включати ці ефекти, але такі розрахунки повинні бути виправлені для квантових ефектів.[9]

Термічний транспорт у двовимірній (2D) та одновимірній (1D) матеріальній системі привертає все більше уваги завдяки фундаментальному характеру питань та практичній важливості теми. Теоретичні передбачення того, що внутрішня теплопровідність K, обмежена лише ангармонічністю кристала, може розходитись із розміром кристала L у 2D та 1D системах, продовжуючи розпалювати дебати. Теоретичні дослідження теплового транспортування ґратки в 2D ангармонічних ґратках Фермі-Паста-Улам (ФПУ), 2D ангармонічних ґратках Леннард-Джонса, 2D гармонійних ґратках з порушенням та 1D ланцюгах FPU припускають, що ґратка, тобто фонон, теплопровідність K, розходиться як $log\ (L)$ для 2D ґраток і як $L\alpha$ для 1D ланцюгів (α <1), де довжина L пропорційна кількості точок ґратки N по напрямку поширення тепла.

Приклади досліджень, які виявили розбіжність у 2D теплопровідності, численні. Ван і Лі дійшли висновку, що в 1D ланцюзі з поздовжнім і поперечним рухами атомів теплопровідність розходиться як $\sim log\ (N)$ або $N\alpha$, залежно від сили поперечних взаємодій. Для сильної поперечної сили, що відновлюється, K розходиться як $log\ (N)$, для проміжної сили як $K \sim N^{1/3}$, а для слабкої міцності як $K \sim N^{2/5}$. Розмірний кроссовер теплопровідності у ґратах ППУ вивчався обчислювально залежно від параметра $\delta = N_x/N_y$, де N_x (N_y) – кількість ділянок ґратки вздовж поздовжнього (поперечного) напрямку x (y). Було встановлено, що $K \sim N\alpha$ для $\delta \ll 1$ (1D випадок), тоді як $K \sim log\ (N)$ в іншому випадку (2D випадок). З іншого боку, були дослідження, які дозволяють припустити, що емпіричний закон Фур'є про теплову провірку справедливий для 1D і 2D систем. Casati та ін. чисельно знайшли кінцеве значення для 1D хаотичної системи багатьох тіл з N частинок. Джексон та Мітріотіс досліджували 1D та 2D ґратки та виявили, що існує діапазон параметрів ґратки для переходу K від нескінченного до кінцевого значення.

Численні молекулярні динамічні (МД) симуляції дали суперечливі результати. Яо та ін. Чжан і Лі дійшли висновку, що теплопровідність ґратки розходиться у вуглецевій нанотрубці (УНТ) зі збільшенням довжини аналогічно строго 1D системам. У той же час, Донадіо та Галлі продемонстрували неперебійну теплопровідність у УНТ, використовуючи як підхід МД, так і підхід кінетичного рівняння Больцмана (КРБ)[10].

Помітне дослідження Мінго та Бройдо встановило, що неперемінна теплопровідність у УНТ є результатом трифононних ангармонічних процесів другого або вищого порядку. Якщо трифононові процеси вважати другим порядком, то теплопровідність спочатку зростає з довжиною УНТ, але потім насичується деяким чітко визначеним кінцевим значенням. Цей результат свідчить про те, що точна обробка внутрішньої теплопровідності низькомірних систем повинна включати трифононні ангармонічні процеси вищого порядку, тобто поза традиційним розсіюванням Умклаппа першого порядку. Додавання розладу кристалічної ґратки або дифузне розсіювання інтерфейсу може усунути необхідність трифонового розсіювання другого порядку для отримання кінцевої теплопровідності для низькомірних систем. Більшість досліджень сходяться на думці, що у тривимірних (3D) кристалах внутрішня теплопровідність, обмежена лише ангармонічністю, має невідривне значення. Трифононне розсіювання Умклаппа першого порядку достатньо для отримання кінцевого *K* у 3D.

Експериментальні дослідження теплового переносу в маломірних системах були проведені з використанням УНТ як квазі-1D-системи та графена як 2D-системи. Як правило, було зареєстровано дуже високі значення як для УНТ, так і для графену. Суспендовані багатошарові плівки графену (few-layer graphene = FLG) були використані для дослідження переходу теплового переносу, коли розмірність системи змінювалася від квазі-2D графена до квазі3D графітових плівок. Сильна залежність довжини спостерігалася експериментально в УНТ, що наштовхувало на думку про

розбиття емпіричного закону Фур'є. Останнє пов'язане з внутрішнім розбіжністю теплопровідності, обговореним вище.

1.4. Застосування наноструктур

Через дуже дрібних розмірів нанокристалічні матеріали виявляють різні властивості, які відрізняються і часто значно покращуються порівняно з звичайними крупнозернистими полікристалічними матеріалами. Захоплююча область нанотехнологій має широке застосування. Використання нанорозмірних матеріалів може покращити продуктивність наявних на сьогодні пристроїв. Найближча версія кремнезему, діоксиду титану, глини, порошкових металів, полімерів та хімічних продуктів буде створена найближчим часом. Нові матеріали з різницевими характеристиками можуть бути також розроблені з наноструктурованих матеріалів. З іншого боку, з'явилися нові продукти, такі як нанотрубки, фулерени, дендримери, квантові точки тощо, які знаходяться на дослідницькому рівні.

Нові області нанонауки та наноінженерії ведуть до безпрецедентного розуміння та контролю над основними складовими всіх фізичних речей. Важливість нанотехнологій зростає з кожним днем через її переваги майже в усіх галузях, таких як електроніка, комп’ютери, медицина, техніка, оборона тощо, крім чистої науки. Наночастинки, нановолокна змінюють сучасну технологію через властивості, що залежать від розміру. Нанопористі матеріали також відіграють важливу роль у нанотехнологіях через деякі незвичні характеристики. Завдяки новим та специфічним властивостям наноструктур у майбутньому можливе набагато більше застосувань[7].

1.5. Висновки до розділу

Нанотехнологія – це мистецтво маніпулювати матеріалами на атомних або молекулярних масштабах, особливо для створення нанорозмірних структур та пристроїв. Поле швидко розширюється, і велика робота триває у проектуванні, характеристиці, синтезі та застосуванні матеріалів, конструкцій,

пристроїв та систем, контролюючи форму та розміри в нанометровому масштабі.

У цьому розділі були розглянуті останні дослідження теплового транспорту в нанорозмірних напівпровідниках. На відміну від сипучих матеріалів нові фізичні та нові теплові властивості виникають у низькорозмірних наноструктурах, таких як аномальна теплопровідність, залежність від величини теплопровідності, розмір фонових / крайових розсіювань. Також показано, що фонони транспортують наддифузійно в структурах низьких розмірів, інакше кажучи, закон Фур'є не застосовується. На основі маніпулювання фононами ми також обговорюємо передбачене застосування наноструктур у широкій області, починаючи від термоелектриків, тепловіддачі до фононічних пристроїв.

2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ ФОНОННИХ СИСТЕМ В БАЛИСТИЧНОМУ РЕЖИМІ

2.1. Ефект Кнудсена

Ефект Кнудсена – це явище перетікання розрідженого газу від нижчої до вищої температури при однакових тисках через наскрізні пори в твердих тілах, непроникних для газів при відносно малих тисках газу або розмірах пор, тобто у випадках, коли довжина вільного пробігу l молекул багато більше характерної діаметра пор L (див. рис. 2.1). Перехід від звичайної дифузії в газах до кнудсеновскої характеризує безрозмірний параметр – числом, або критерій Кнудсена – Kn:

$$Kn = \frac{l}{L}, \tag{2.1}$$

тобто, при Kn >> 1 коли ймовірність зіткнень молекул газу зі стінками пор у багато разів перевищує ймовірність взаємних зіткнень молекул.

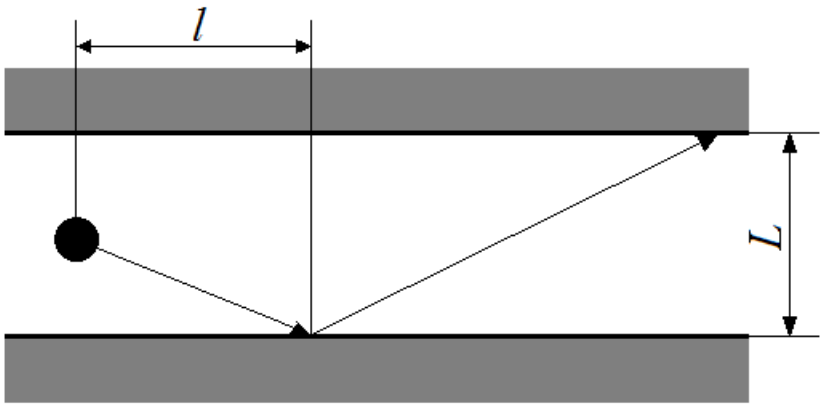


Рис. 2.1. Схема кнудсеновської дифузії

Розглянемо на прикладі витікання сильно розрідженого газу з маленького отвору (з лінійними розмірами L). У граничному випадку $l/L >> 1$ цей процес набуває досить простого характеру. Молекули будуть залишати посудину

незалежно одна від одної, утворюючи молекулярний пучок, в якому кожна молекула рухається з тією швидкістю, з якою вона підійшла до отвору. Число молекул, що виходять в 1 секунду з отвору, збігається з числом зіткнень, які зазнали б за цей час молекули газу з площею поверхні, що дорівнює площі отвору *s*.[2,3]

Числ зіткнень dv_{v} молекул в одиницю часу (віднесене до одиниці площі поверхні стінки), при яких компоненти швидкості належать до заданих інтервалів dv_x, dv_y, dv_z, вийде множенням розподілу Максвелла на об'єм циліндра з основою 1 см^2 і висотою, яка дорівнює v_z. Ми отримаємо тоді

$$dv_{\text{v}} = \frac{N}{V}\left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2T}(\upsilon_x^2+\upsilon_y^2+\upsilon_z^2)}\upsilon_z d\upsilon_x d\upsilon_y d\upsilon_z. \qquad (2.2)$$

Звідси легко знайти повне число v_{v} ударів молекул газу об одиницю поверхні стінки судини в одиницю часу. Для цього проінтегруємо по всім швидкостям v_z від 0 до ∞ і по v_x і v_y від –∞ до +∞. Це дає

$$\nu = \frac{N}{V}\sqrt{\frac{T}{2\pi m}} = \frac{P}{\sqrt{2\pi m T}} \qquad (2.3)$$

(щільність газу виражена через його тиск відповідно до рівняння Клапейрона).

Таким чином, для кількості (маси) газу, що витікає за 1 с, знаходимо

$$Q = sP\sqrt{\frac{m}{2\pi T}}. \qquad (2.4)$$

Якщо дві посудини з газом з'єднані одна з одною отвором (рис. 2.2), то у випадку $l << L$ при механічній рівновазі тиск P_1 і P_2 газів в обох судинах буде однаковими, незалежно від значень їх температур T_1 і T_2.[4]

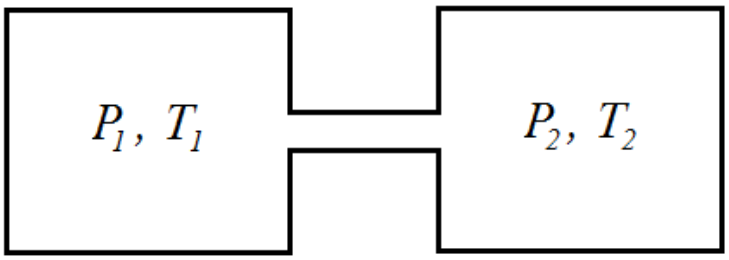


Рис. 2.2. Дві посудини з газом з'єднані одна з одною отвором

Тобто газ можна розглядати як суцільне середовище, і умова рівноваги в цьому випадку носить гідродинамічний характер. В протилежному випадку, коли довжина вільного пробігу велика в порівнянні з поперечними розмірами отвору ($l >> L$), гідродинамічних підхід є непридатним. Тут умовою механічної рівноваги буде рівність чисел молекул, які переходять через отвір з однієї судини в іншій. Згідно з (2.4) це призводить до рівності

$$\frac{P_1}{\sqrt{T_1}} = \frac{P_2}{\sqrt{T_2}}. \qquad (2.5)$$

Таким чином, тиск розріджених газів в двох сполучених посудинах будуть різними, причому вони ставляться один до одного як коріння з їх температур.

2.2. Проблема випромінювання абсолютно чорного тіла

Концепція абсолютно чорного тіла була введена Г. Кіргохфом в 1862 році. Абсолютно чорним тілом називають тіло, яке поглинає все що потрапляє на нього випромінювання. Якщо воно знаходиться в термодинамічній рівновазі, то відповідно до закону збереження енергії, воно не тільки поглинає випромінювання, а й випромінює саме. Інакше поглинання падаючого випромінювання призведе до нескінченного зростання температури.

У 1879 році Й. Стефан емпірично відкрив закон, який через п'ять років був виведений теоретично Л. Больцманом з використанням теорії Максвелла. Надалі він був названий законом Стефана-Больцмана. Цей закон пов'язував

повний потік випромінювання від абсолютно чорного тіла з його температурою:

$$\frac{P}{S} = \sigma T^4, \tag{2.6}$$

де σ – так звана постійна Стефана-Больцмана, яка може бути виражена через фундаментальні константи шляхом інтегрування по всіх частотах формули Планка. Закон був підтверджений експериментально в 1880 голу Л. Герцем.

В.Він, використовуючи термодинаміку і теорію електрики, в 1893 році вивів перший закон Віна для спектральної щільності випромінювання чорного тіла:

$$\frac{dP}{d\nu} = \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right). \tag{2.7}$$

Звідси, слід закон зміщення Віна: положення максимуму ν_{max} в спектрі випромінювання чорного тіла визначається тільки його температурою, $\nu_{max} = AT$. За ці роботи Він був удостоєний Нобелівської премії з фізики 1911 року[5].

Однак точний вид спектральної функції випромінювання чорного тіла з класичних міркувань вивести неможливо. У 1900 році Релей вивів спектральну функцію, цей висновок був приведений в більш сувору форму Джинсом (1905). Відповідно до закону Релея-Джинса

$$\frac{dP}{d\nu} = \frac{2\nu^2 kT}{c^2}. \tag{2.8}$$

Передбачення класичної теорії відповідають досвіду при низьких частотах. Однак, із зростанням частоти спектральна щільність *dP/dv* необмежено зростає, так що повна випромінена енергія виявляється нескінченно великою. Здобутий висновок отримав назву «ультрафіолетової катастрофи». У 1896 році на підставі емпіричних міркувань Він запропонував

інший вид спектральної функції, позбавлений цієї проблеми (другий закон Вина):

$$\frac{dP}{d\nu} = C_1 \nu^3 e^{-C_2 \nu/T}. \quad (2.9)$$

Але ця формула не описує правильну низкочастотну поведінку, крім цього, в ній містяться невідомі константи C_1 і C_2. Вона призводить до так званої «ультрафіолетової катастрофи» – спектральна щільність випромінювання нескінченно зростає зі збільшенням частоти, так що потужність, що випромінюється по всьому спектру, звертається в нескінченність

$$P_{\text{полн}} = \int_0^\infty \frac{dP}{d\nu} d\nu. \quad (2.10)$$

2.3. Випромінювання абсолютно чорного тіла

Для аналізу проблеми зручніше розглянути іншу модель абсолютно чорного тіла (див. рис. 2.3.). Розглянемо порожнину об'єму *V* всередині масивного твердого тіла, що має температуру *T*. Нехай ця порожнина сполучається з навколишнім простором отвором площі *S*, яка буде малою в порівнянні з площею стінок порожнини. Всі розміри (в тому числі і розміри отвору) досить великі в порівнянні з характерними довжинами хвиль, так що ефекти дифракції не істотні. Стінки порожнини будемо вважати майже ідеально дзеркальними. З точки зору зовнішнього спостерігача ця дзеркальна порожнина буде вести себе як абсолютно чорне тіло: промінь світла, що йде ззовні, потрапляє всередину порожнини і, після безлічі відображень, поглинається. Ймовірність того, що він «знайде» отвір і покине порожнину мала в силу малого розміру площі отвору.

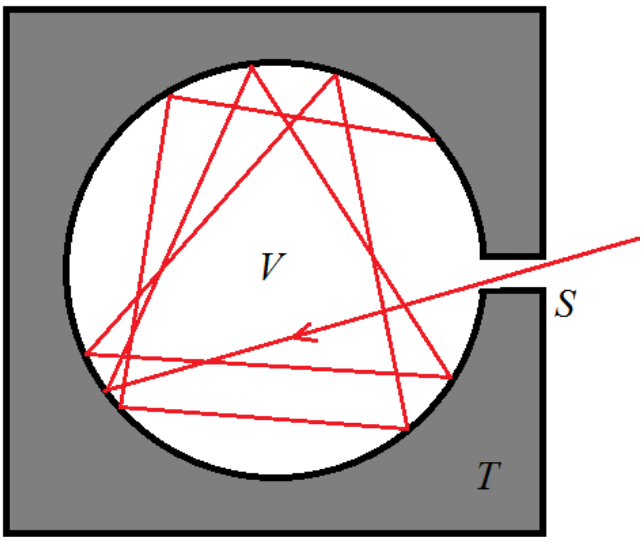


Рис. 2.3. Модель абсолютно чорного тіла

Атоми і іони матеріалу стінок порожнини здійснюють теплові коливання і випромінюють електромагнітні хвилі. Отже, всередині порожнини існує електромагнітне випромінювання. Невелика частина цього випромінювання виходить через отвір в навколишній простір, зберігаючи той же розподіл потужності по частоті, що і теплове випромінювання всередині порожнини. Тому завдання про спектр випромінювання з отвору (спектрі випромінювання чорного тіла) еквівалентна задачі про знаходження спектра випромінювання всередині порожнини.

Виділимо якусь частоту випромінювання в порожнині і розглянемо коливання електромагнітного поля на цій частоті. Це випромінювання перебуває в стані динамічної рівноваги: випромінювання «нових» хвиль через теплового руху в стінках порожнини в точності так само поглинання «старих» хвиль стінками. За гіпотезою Планка випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль відбувається квантами. Таким чином, в розглянутої нами моді коливань електромагнітного поля може бути заготовлено тільки ціле число квантів:

$$E_n(\omega) = n\hbar\omega. \qquad (2.11)$$

Так як випромінювання перебуває в стані динамічної рівноваги зі стінками при температурі T, то при тепловій рівновазі температури тіл рівні, а ймовірність виявити систему з температурою T в стані з енергією E_n описується розподілом Больцмана. Таким чином, для знаходження середньої запасеної енергії необхідно усереднити енергії різних станів за допомогою розподілу Больцмана. Математично це еквівалентно задачі про гармонійний осцилятор

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \tag{2.12}$$

Для того, щоб обчислити повну енергію всіх коливань необхідно підсумувати середню енергію по всім осциляторам, тобто проінтегрувати отримані вирази:

$$E = \int \bar{E}\, d\Gamma = \int \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \frac{d^3r\, d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = V \int \varepsilon n(T) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{2.13}$$

Розділивши отриманий вираз на об'єм V і зробивши заміну

$$z = \frac{\varepsilon}{kT}, \tag{2.14}$$

отримаємо

$$\frac{E}{V} = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 c^3} \cdot (kT)^4 \cdot \int_0^\infty \frac{z^4 dz}{e^z - 1} = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 c^3} \cdot (kT)^4 \cdot \int_0^\infty \frac{z^3 e^{-z} dz}{1 - e^{-z}}. \tag{2.15}$$

Інтеграл в отриманому виразі може бути представлений як добуток дзета-функції Рімана та гамма-функції, значення яких можна визначити як

$$\zeta(4) \cdot \Gamma(4) = \frac{\pi^4}{90} \cdot 4! = \frac{\pi^4}{15}. \tag{2.16}$$

Отже, можна отримати вираз для потужності випромінювання

$$P = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3 c^2} \cdot (kT)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} = \sigma T^4, \qquad (2.17)$$

який відповідає закону Стефана-Больцмана. Постійна Стефана-Больцмана

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^2}{60 c^2} = \frac{2\pi^5 k^4}{15 c^2 h^3} \approx 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4} \qquad (2.18)$$

не є фундаментальною постійною – вона є комбінацією інших констант і деяких чисельних множників. Відзначимо, що хоча сама постійна Стефана-Больцмана мала, велика ступінь, в якій входить температура в закон Стефана-Больцмана, робить теплове випромінювання досить важливим фактором в теплообміні.

2.4. Фононна радіаційна передача тепла

У чистих діелектричних монокристалах при низьких температурах фонони розсіюються лише на поверхні кристалів. Транспортування тепла в цих умовах вперше обговорив Казимир. Він розглядав довгий вузький зразок із ідеально шорсткими поверхнями, на яких розсіюється кожен падаючий фонон. Це дослідження стосується кристалів, що мають дуже дзеркальні поверхні, на яких фонони розсіюються дифузно лише з невеликою ймовірністю p Ця дзеркальність $(1 - p)$ збільшить теплопровідність зразка.

Фонони в діелектричних кристалах не перетворюватимуться в інші збудження, в той час як фотони "розпадаються" в теплові (фонони) при взаємодії з речовиною. Ще однією перевагою експериментів з випромінюванням фононного випромінювання є те, що кристал забезпечує порожнину, яка обмежена інтерфейсом з непровідним середовищем, так що фонони повністю містяться в кристалі. Такий експериментальний контроль неможливий при експериментах з перенесенням теплового випромінювання фотонами.

Тим не менш, можна витягнути вільний шлях $\bar{l}$ від фонону, який залежить від температури, таким же чином, як і для вимірювань теплопровідності, маючи на увазі, що цей середній вільний шлях не є внутрішньою властивістю кремнію. Коротко розглянемо деякі основні визначення та формули.

Теплопровідність визначається шляхом вимірювання температурного градієнта $\Delta T/\Delta x$, викликаного тепловою потужністю $\dot{Q}$, що протікає рівномірно через стрижневий кристал перерізу S:

$$\Lambda = \frac{\dot{Q}/S}{\Delta T/\Delta x}. \tag{2.19}$$

У газокінетичній картині теплопровідність може бути використана для визначення фононного середнього вільного шляху $\bar{l}$ у домінуючому фононному наближенні:

$$\Lambda = \frac{1}{3} C_v \upsilon \bar{l}, \tag{2.20}$$

де C_v – питома теплоємність Дебая на одиницю об'єму. Середня швидкість звуку υ задається рівнянням

$$\frac{1}{\upsilon^3} = \overline{\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\upsilon_i^3}}, \tag{2.21}$$

де υ_i – групові швидкості трьох різних режимів, а смуга позначає середнє значення за напрямами поширення. У температурному діапазоні нашого дослідження об'ємне розсіювання фононів у наслідку недоліків ґратки, домішків та процесів перекиду є незначним у високоякісних монокристалах кремнію. Крім того, об'ємне розсіювання фононо-фононів через N ("нормальні") процесів також є незначним, тому ефектів в'язкості фононових газів (наприклад, потоку Пуазеля) немає. Тому фонони рухаються прямими балістичними стежками і можуть бути розкидані лише на поверхні кристалів. У цьому режимі граничного розсіювання ми можемо виразити

експериментальну величину, обчислену за допомогою рівняння (2.19) (часто вільно називають теплопровідністю) способом, аналогічним рівнянню (2.20):

$$\Lambda = \frac{1}{3} \mathrm{C}_v \bar{\upsilon} \bar{l}. \qquad (2.22)$$

Якщо кожен фонон, що потрапляє на поверхню, дифузно розсіюється, наприклад, у випадку шорстких піскоструминних поверхонь, то $\bar{l}$ близький до діаметра зразка. Зокрема, обмеження Казимира задається через $\bar{l}_c = 1.12\sqrt{S}$ для довгого зразка квадратного перерізу S, а $\bar{l}_c = 2R$ для довгого циліндричного зразка радіуса R. Якщо можуть відбуватися окулярні відбиття, середній вільний шлях $\bar{l}$ збільшиться за межами цієї межі, тобто виміряне Λ зросте[11].

2.5. Постановка проблеми

В якості об’єкта дослідження ми розглядаємо прямокутну двовимірну смужку шириною W і довжиною L (див. рис. 3.1). Для фононної системи цього зразка ми припускаємо один тип поляризації та відношення ізотропної енергії та імпульсу ω = ω(**k**). Потім вводимо двовимірну енергетичну густину E і двовимірну густину теплоємності (при постійній площі) C_S:

$$E = \int \hbar\omega \, n(T) \frac{d^2k}{(2\pi)^2}. \quad C_S = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_S = \int \hbar\omega \frac{\partial n(T)}{\partial T} d\Gamma \qquad (2.23)$$

Тут n(T) – функція розподілу фононів. У рівнянні (2.23) фонони різної поляризації можуть бути враховані у разі необхідності.

Як тепловий потік ми розглядаємо двовимірний тепловий потік

$$\boldsymbol{Q} = \int \hbar\omega \mathbf{v}_{gr} n(T) d\Gamma. \qquad (2.24)$$

Значення **Q** – витрата енергії на одиницю часу і через одиницю довжини і має розмірність Дж/(см · с). Величина $\mathbf{v}_{gr}$ – групова швидкість фононів

$$\boldsymbol{v}_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k}\boldsymbol{k}. \tag{2.25}$$

В якості джерел тепла ми розглядаємо теплові резервуари нескінченної теплоємності з заданими температурами: гарячі з температурою T_h і холодні з температурою T_c, які знаходяться в тепловому контакті з торцями H_0H_1 і C_0C_1 (див. Рис. 3.1) відповідно. Передбачається, що ці резервуари забезпечують постійну температуру з цих боків. У цьому випадку потік тепла, який випромінюється цими стінками, визначатиметься законом випромінювання абсолютно чорного тіла

$$Q_{BBR}(T) = \int \hbar\omega\, n(T)\left(\boldsymbol{v}_{gr}\boldsymbol{e}\right)d\Gamma = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos(\varphi)\, d\varphi \int_0^{\infty} \frac{kdk}{(2\pi)^2}\hbar\omega n(T) v_{gr}. \tag{2.26}$$

Тут **e** нормаль до випромінюючої поверхні.

Далі тут зручно ввести поняття ефективної швидкості фонону

$$V_{eff} = \frac{\int \hbar\omega v_{gr}\,(\omega) n(T) d\Gamma}{\int \hbar\omega\, n(T) d\Gamma} \tag{2.27}$$

який можна використовувати для того, щоб переписати вираз для усередненого теплового потоку зі стінки наступним чином:

$$Q_{BBR} = \frac{1}{\pi} V_{eff} E \tag{2.28}$$

3. ФОНОННА ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ ДВОВИМІРНИХ НАНОСТРУКТУР

Зараз ми розглянемо різні моделі взаємодії фононів із бічними сторонами, які визначають фізичні умови для відображення фононів на сторонах зразка.

3.1. Абсолютно поглинаюча межа

Для введення основних термінів ми розглянемо обмежувальний випадок, коли бічні межі вибірки абсолютно поглинають. Іншими словами, температури на межах H_0C_0 і H_1C_1 встановлюються рівними нулю

$$T_1(z) = 0 \quad \text{і} \quad T_2(z) = 0. \tag{3.1}$$

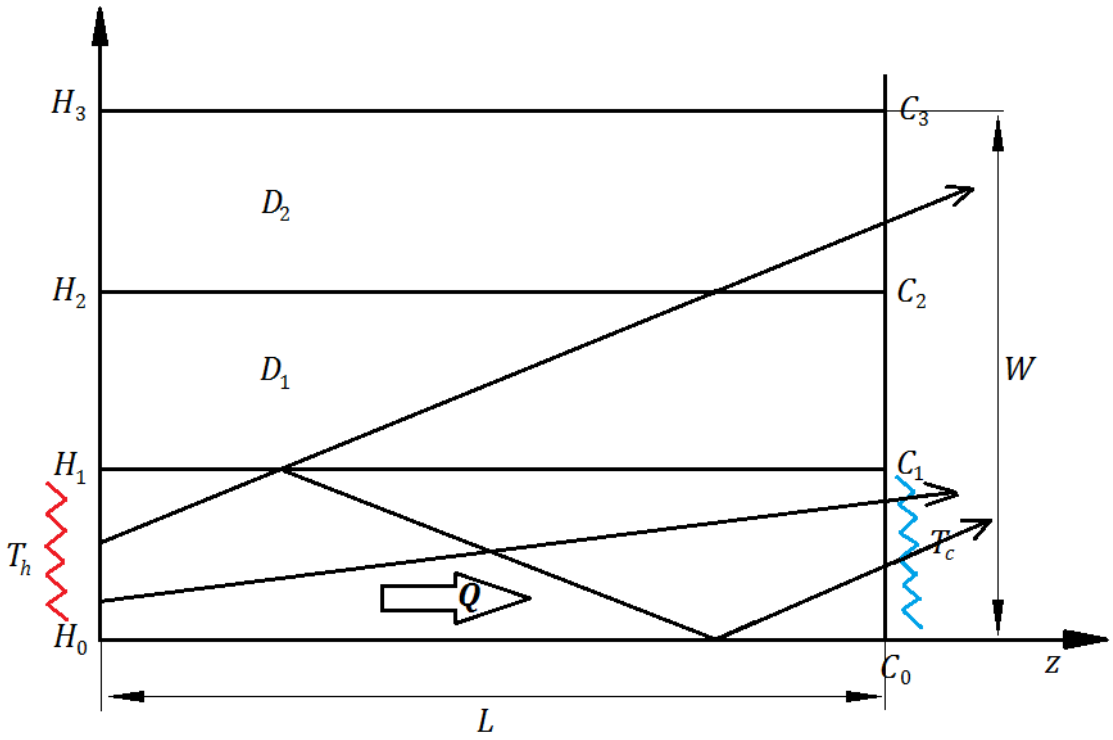


Рис. 3.1. Геометрія задачі

Незважаючи на уявну неприродність такої межі абсолютно поглинаючої межі, така межа може бути організована, зокрема, тепловим контактом із

надлишковим гелієм або надпровідником, температура яких значно нижча за середню температуру зразка.

У цьому випадку отриманий тепловий потік визначатиметься лише фононами, які випромінюються на гарячу стінку, падають на холодну і, навпаки (без відображення від бічних стінок). Тоді отримана щільність теплового потоку визначається лише різницею

$$Q_0 = Q(H_0H_1 \to C_0C_1) - Q(C_0C_1 \to H_0H_1) = Q_{h0} - Q_{c0} \qquad (3.2)$$

Тут

$$Q_{h0} = Q_{BBR}(T_h) \cdot R_0 \quad \text{і} \quad Q_{c0} = Q_{BBR}(T_c) \cdot R_0 \qquad (3.3)$$

Значення R_0 дорівнює частині загальної енергії, що випромінюється однією із сторін, яка буде йти безпосередньо на іншу сторону, без відбитків у бічних стінках. Він визначається ізотропним характером випромінювання (2.21) та геометричними розмірами зразка:

$$R_0 = \frac{\int_0^W \frac{dx}{W} 2\int_0^{arctg(x/L)} cos(\varphi)d\varphi}{2\int_0^{\pi/2} cos(\varphi)d\varphi} = \frac{\sqrt{W^2+L^2}-L}{W} = \frac{W}{\sqrt{W^2+L^2}+L}. \qquad (3.4)$$

Зі відношення (3.2) для малих перепадів температур отримаємо вираз

$$Q_0 = Q_{h_0} - Q_{c_0} \approx \frac{1}{\pi} V_{eff} \frac{dE}{dT}(T_h - T_c)R_0 = \frac{1}{\pi} V_{eff} C_S (T_h - T_c)R_0. \qquad (3.5)$$

Тепер ми можемо ввести ефективний коефіцієнт теплопровідності, як коефіцієнт пропорційності між щільністю теплового потоку та відношенням різниці температур до довжини зразка:

$$Q_0 = \kappa_{eff} \frac{(T_h - T_c)}{L}. \qquad (3.6)$$

Коефіцієнт теплопровідності виявляється у вигляді, який є звичайним для фононних систем:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_0. \tag{3.7}$$

Цей вираз містить інформацію про розмірність провідника (два в знаменнику), теплоємність фононного газу, ефективну швидкість і ефективну довжину шляху фононів:

$$\Lambda_0 = \frac{2}{\pi} L R_0 = \frac{2}{\pi} \frac{WL}{\sqrt{W^2 + L^2} + L}. \tag{3.8}$$

Для великих W і (або) малих L наявністю бічних меж можна знехтувати, а тепловий потік виявляється рівним різниці потоків від гарячих і холодних країв і не залежить від відстані L між ними.

У цій межі слід зазначити два пункти. Перший – відсутність температурного градієнта всередині зразка, тобто залежність температури від координати всередині зразка повинна бути представлена таким чином:

$$T(x, z) = T_1(z) = T_2(z) = \frac{T_h + T_c}{2}. \tag{3.9}$$

Таке вираження температури можна пояснити хоча б із симетрії проблеми. Однак тут виникає питання визначення температури всередині зразка за відсутності термодинамічної рівноваги у фононній системі. Як можливе визначення температури в цих ситуаціях, слід ввести поняття термометра, який вимірює щільність теплового потоку. У цьому випадку температура визначається як температура абсолютно чорного тіла з однаковою щільністю потоку.

У випадку малого W і (або) великого L отриманий тепловий потік визначається шириною зразка, а середній вільний шлях фононів визначається співвідношенням, подібним до відповідного виразу для тривимірного тепла провідники в цій межі:

$$\Lambda_0(W \to 0) = \frac{1}{\pi} W. \tag{3.10}$$

Тут потрібно обговорити два моменти. Перший стосується того, що, з одного боку, фізичне значення виразу (3.10) визначається невеликим кутом, при якому, наприклад, холодна сторона бачиться від точок теплої сторони, а не реальним зменшенням середнього вільного шляху кожного і кожного фонона. З іншого боку, величину (3.10) можна інтерпретувати як середній вільний шлях, усереднений по всіх фононах, і оскільки лише невелика їх частина досягає протилежної сторони, середній вільний шлях виявляється таким малим.

Другий момент стосується наявності температурного градієнта, при якому (3.6) можна переписати в диференційній формі, що діє в кожній точці зразка.

$$\boldsymbol{Q}_0(z) = -\kappa_{eff} \nabla T(z) \tag{3.11}$$

Цей вираз відповідає звичайній градієнтній формі для теплового потоку. Однак у цьому випадку слід зазначити, що це вираження для теплових потоків записується після усереднення по поперечній координаті *x* (3.4).

Однак тут виникає основна проблема такого підходу. Тепловий потік (3.11) виявляється функцією координати з тієї причини, що бічні стінки не є теплоізольованими, а підтримуються при постійній температурі. З цієї причини різниця теплових потоків на кінцях зразка представлена в (3.2) як бажаний тепловий потік, але не постійний тепловий потік по всій довжині зразка. Отже, у цій проблемі насправді ми вивчаємо не теплопровідність зразка, а властивості всієї системи в цілому, що значно визначаються тепловим контактом на бічних межах зразка.

Цей приклад показує, що відсутність теплоізоляції на бічних межах може призвести до суперечливих результатів у визначенні коефіцієнта теплопровідності.

Під час експериментів такий тепловий контакт можливий через поверхню підкладки, на яку наноситься зразок. У випадку теоретичного розгляду необхідно ретельно розглянути формулювання граничних умов. Зокрема, для обговорення потрібне припущення про наявність лінійного градієнта температури на бічних межах, який використовується в моделі Казимира. У цій роботі далі ми досліджуємо можливість формування стаціонарного нерівноважного постійного теплового потоку завдяки лише специфічним особливостям взаємодії фононів із межами.

3.2. Абсолютно дзеркальна межа

У випадку абсолютно дзеркальних бічних кордонів всі фонони, що випромінюються нагрівачем та охолоджувачем, досягають протилежних кінців без втрат. Це призводить до очевидного результату, що тепловий потік не буде залежати від довжини провідника. У цьому випадку теплопровідність, визначена відношенням (3.6), лінійно зростатиме з довжиною. Аналогічний результат випливає з (3.7) межі малого Λ, але в цьому випадку всі фонони падають на протилежні кінці через відсутність відбитків у бічних стінках.

Отримаємо той же результат аналітично, враховуючи всі фононні відбитими від бічних стінок. Для обліку всіх відображень ми використовуємо метод зображень. У цьому способі фонон, що рухається, наприклад, по траєкторії $A_2D_1B_2$ на рис. 3.1, розглядається як фонон, що вільно рухається по шляху $A_2D_1B_3$, де точка B_3 – зображення точки B_2 у бічній стінці H_1C_1. У цьому випадку потік фононів, який має точно n відбиття від бічних стінок і випромінювався теплим (лівим) кінцем

$$Q_h^{(n)} = Q(H_0H_1 \to C_nC_{n+1}) + Q(H_0H_1 \to C_{-n}C_{-n+1}) = \\ = 2Q(H_0H_1 \to C_nC_{n+1}) \qquad (3.12)$$

і холодним (правим) кінцем

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

$$= 2Q(C_0C_1 \rightarrow H_nH_{n+1}), \quad (3.13)$$

де n = 1,2,3…, визначені наступними рівняннями:

$$Q_h^{(n)} = Q_{BBR}(T_h) \cdot (R_n - R_{n-1}) \quad \text{і} \quad Q_c^{(n)} = Q_{BBR}(T_c) \cdot (R_n - R_{n-1}). \quad (3.14)$$

Величини R_n визначаються інтегралом, аналогічним (3.4)

$$R_n = \frac{1}{W}\int_0^W dx \int_0^{\varphi_n(x)} \cos(\varphi)\, d\varphi. \quad (3.15)$$

але з іншими межами (лімітами) кутової змінної:

$$sin\,\phi_n\,(x) = \frac{(n+1)W - x}{\sqrt{((n+1)W - x)^2 + L^2}}. \quad (3.16)$$

У результаті

$$R_n = \frac{1}{W}\left(\sqrt{(n+1)^2W^2 + L^2} - \sqrt{n^2W^2 + L^2}\right). \quad (3.17)$$

З цього відношення, очевидно, випливає, що якщо відображення є дзеркальними, відповідні терміни скасовуються, якщо підсумувати величини (3.12) або (3.13):

$$Q = \sum_0^\infty Q_n = Q_{BBR}\left(R_0 + \sum_1^\infty [R_n - R_{n-1}]\right) = Q_{BBR}R_\infty \equiv Q_{BBR} \quad (3.18)$$

Тут R_∞ = 1 є граничним значенням R_n, коли n прагне до нескінченності.

Ця відповідь є досить очевидною і говорить про те, що за відсутності резистивних процесів неможливо створити градієнт температури всередині зразка. Тепер ми можемо приступити до розгляду можливих резистивних процесів на межах, які призведуть до наявності градієнта температури всередині провідника і, отже, до кінцевого значення коефіцієнта теплопровідності.

3.3. Кінцеве значення віддзеркалень (відображень)

Найпростішою моделлю таких процесів є обмеження кількості відображень N. У цьому випадку після взаємного зменшення значень R_n залишається лише останній з них:

$$Q_N = \sum_0^N Q_n = [Q_{BBR}(T_h) - Q_{BBR}(T_c)] \cdot R_N = \\ = \frac{\Delta Q}{W}\left(\sqrt{(N+1)^2W^2 + L^2} - \sqrt{N^2W^2 + L^2}\right). \quad (3.19)$$

Для зручності подальших обговорень вводиться нормалізований тепловий потік, який безпосередньо пов'язаний з ефективним середнім вільним шляхом фононів:

$$q = \frac{Q_N}{\Delta Q} = \frac{\pi}{2L}\Lambda \quad (3.20)$$

Таким чином, для кінцевої кількості відображень цей тепловий потік є

$$q_N = \frac{(2N+1)W}{\sqrt{(N+1)^2W^2 + L^2} + \sqrt{N^2W^2 + L^2}} \quad (3.21)$$

Для нескінченного N ми отримуємо межу повністю дзеркальних відображень (3.18)

$$q_{spec} = 1 \quad (3.22)$$

яка не залежить від розмірів зразка.

У випадку скінченного N для коротких вибірок, коли внесок відбитків стає незначним, результат знову схожий на (3.22)

$$q_{norefl} = 1. \quad (3.23)$$

Для досить вузьких і довгих провідників при кінцевому N ми отримаємо

$$q_{N0} = \frac{2N+1}{2}\frac{W}{L}. \tag{3.24}$$

Таким чином, для ефективного фононного середнього вільного шляху

$$\Lambda_{N0} = \frac{2N+1}{\pi}W \tag{3.25}$$

ми отримуємо значення, яке визначається шириною *N*-кратного зразка.

3.4. Приклад поглинання на кордоні

Іншим простим резистивним процесом, який можна запропонувати, є поглинання на межі, при якому кут відображення фонона дорівнює куту падіння, але кількість фононів зменшується до (1 – p) разів, тобто значення p аналогічно ймовірності абсолютно дзеркального відображення. У цьому випадку тепловий потік визначається сумою нескінченного ряду, який сходиться

$$q_p = q_0 + \sum_1^\infty q_n p^n =\cdot R_0 + \sum_1^\infty (R_n - R_{n-1})p^n. \tag{3.26}$$

У цілому, ми можемо змінити умови і одержати більш простий вираз:

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

$$= (1-p)\left[\frac{W}{\sqrt{W^2+L^2}+L} + \sum_1^\infty \frac{(2n+1)W}{\sqrt{(n+1)^2W^2+L^2}+\sqrt{n^2W^2+L^2}}p^n\right]. \tag{3.27}$$

Для великих *W* ми отримуємо очікувані результати

$$q_{p\infty} = (1-p)\left[1 + \sum_1^\infty p^n\right] = (1-p)\left[1 + \frac{p}{1-p}\right] = 1, \tag{3.28}$$

оскільки віддзеркалення не мають впливу через малу відстань між нагрівачем та охолоджувачем.

Для вузького і довгого зразка ми отримуємо (див. рис. 3.2.)

$$q_{p0} = (1-p)\frac{W}{2L}\left[1 + \sum_{1}^{\infty}(2n+1)p^n\right] = \frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}, \qquad (3.29)$$

і для ефективної довжини

$$\Lambda_{p0} = \frac{W}{\pi}\frac{1+p}{1-p} = \Lambda_0\frac{1+p}{1-p}. \qquad (3.30)$$

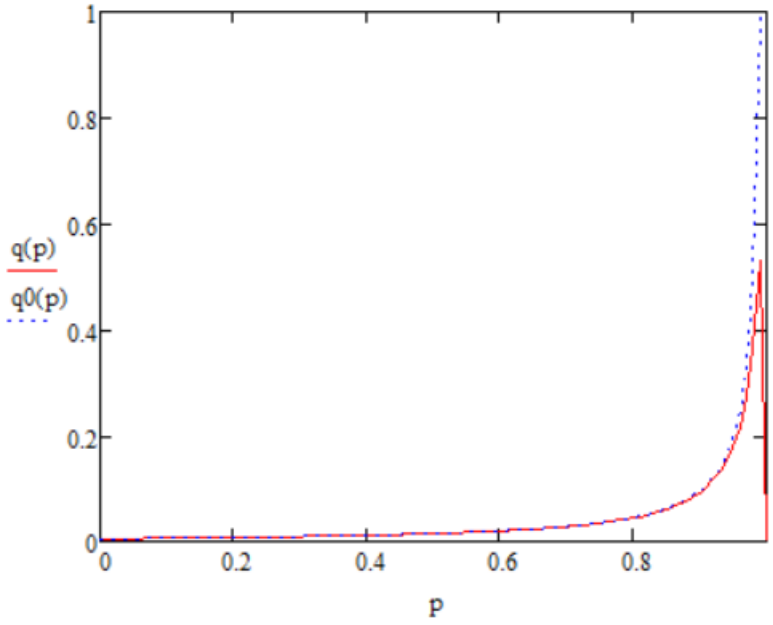


Рис. 3.2. Апроксимація для вузького і довгого зразка

Цей результат містить добре відомий знаменник, який враховує ефективність дзеркального відображення p і дає правильний граничний перехід до випадку повного поглинання на межах (3.8), коли $p = 0$. Але в нашому підході результат невірний, оскільки незалежно від того, наскільки вузький провідник, починаючи з якого члена ряду, співвідношення *W/L*

перестає бути малим. Щоб уникнути розбіжності, ми пропонуємо наступну формулу наближення

$$q_{p0app} = \frac{\frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}}{1+\frac{W}{2L}\frac{1+p}{1-p}} = \frac{W(1+p)}{2L(1-p)+W(1+p)}, \tag{3.31}$$

яка описує реальну суму (3.27) з високою точністю (див. рис. 3.3).

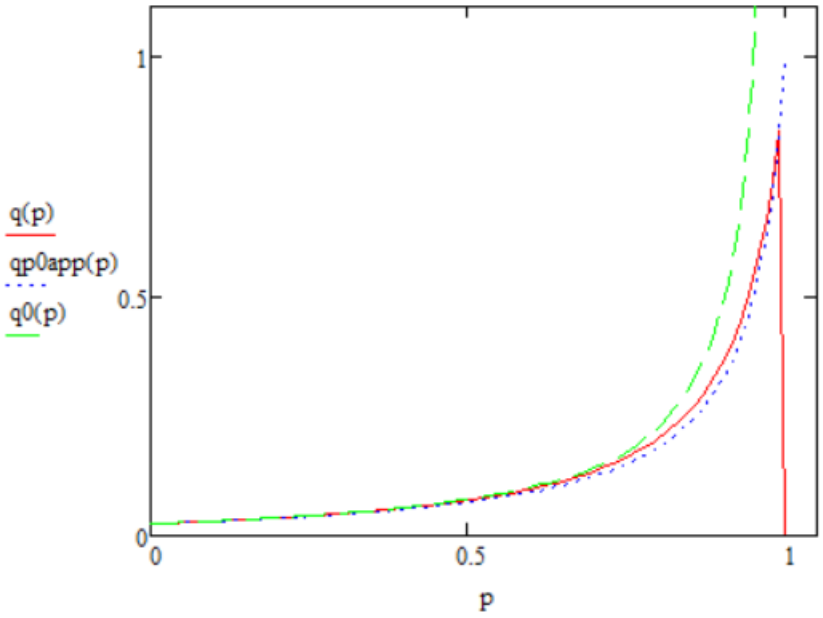


Рис. 3.3. Порівняння апроксимацій (3.29) та (3.31)

Як результат, для ефективної довжини ми отримуємо наступний результат

$$\Lambda_p = \Lambda_0 \frac{1}{\frac{1-p}{1+p}+\frac{W}{2L}}, \tag{3.32}$$

які можуть бути використані у всьому діапазоні значення p та відношенні W/L ширини та довжини зразка.

3.5. Приклад поглинання у зразку

Метод зображення дозволяє врахувати можливі резистивні процеси всередині зразка. Такі процеси можуть включати поглинання фононів іншими підсистемами квазічастинок, наприклад, електронами. У цьому випадку ми припускаємо, що середній вільний шлях фонона дорівнює λ. Тоді, при припущенні експоненціального поглинання, для значень Rn, що визначають тепловий потік, отримуємо вираз

$$R_n(\lambda) = \frac{1}{W}\int_0^w dx \int_0^{\varphi_n(x)} \exp\left(-\frac{L}{\lambda\cos(\varphi)}\right) d\sin(\varphi). \qquad (3.33)$$

Для нормалізованого теплового потоку (3.20) отримуємо результат, аналогічний (3.18):

$$q_\lambda = R_\infty(\lambda). \qquad (3.34)$$

Тобто

$$q_\lambda = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \exp\left(-\frac{L}{\lambda\cos(\varphi)}\right) d\sin(\varphi). \qquad (3.35)$$

Для приблизного аналітичного розрахунку для випадку $\lambda >> L$ підставляємо експоненту у рівнянні (3.31) за наближенням

$$q_\lambda \approx \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(1 - \frac{L}{\lambda\, cos(\varphi)}\right) d\, sin(\varphi) = 1 - \frac{\pi}{2}\frac{L}{\lambda} \approx \exp\left(-\frac{\pi}{2}\frac{L}{\lambda}\right). \qquad (3.36)$$

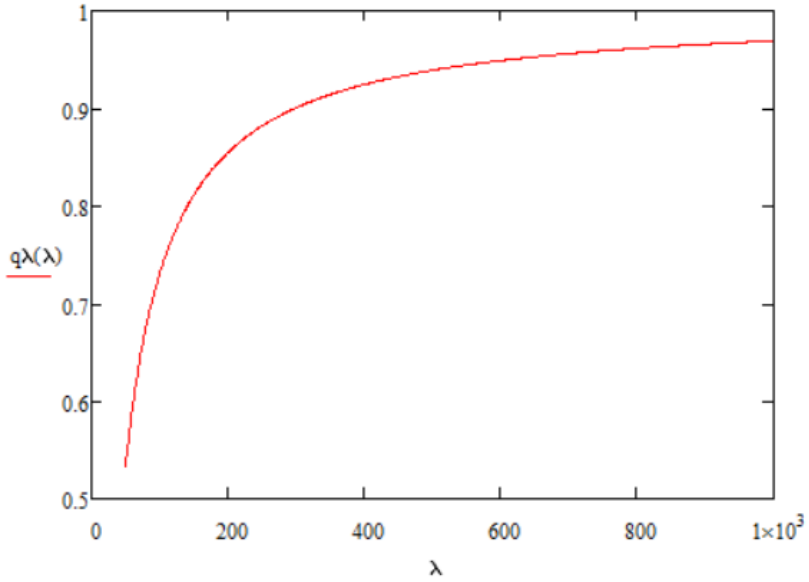


Рис. 3.4. Залежність теплового потоку від λ

Ця апроксимуюча формула досить добре описує випадок λ > L (див. Рис. 3.4.) і може бути використана для визначення ефективної довжини шляху:

$$\Lambda = \frac{2L}{\pi}\exp\left(-\frac{\pi L}{2\lambda}\right), \tag{3.37}$$

Цей результат не включає інформацію про ширину зразка, і причина цього, як у (3.30), є повністю дзеркальним відображенням на межах.

Об'єднана формула

$$q_{app} = \frac{1}{\frac{2L(1-p)}{W(1+p)}\frac{1}{2N+1} + \exp\left(\frac{\pi}{2}\frac{L}{\lambda}\right)}, \tag{3.38}$$

На рис. 3.5 показано співвідношення між (3.27), (3.31) та (3.38).

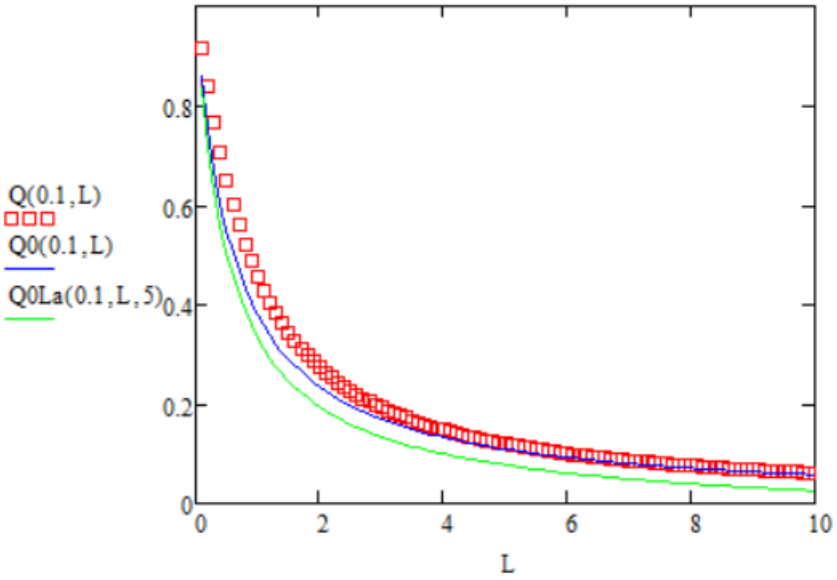


Рис. 3.5. Графіки залежностей різних виразів для теплових потоків при різних розмірах системи

Так як число відображень кінцеве, можна перетворити суму ряду

$$\sum_{n=1}^{N}(2n+1)\cdot p^n \rightarrow$$

$$\rightarrow -\frac{p\cdot(p+2N\cdot p^N-p\cdot p^N+3\cdot p^N-2\cdot N\cdot p\cdot p^N-3)}{(p-1)^2}. \qquad (3.39)$$

Тоді вираз (3.27) набуває вигляду

$$q_p=\frac{(1-p)W}{2L}[1-$$

$$-\frac{p^2+2N\cdot p^{N+1}-p^{N+2}+3\cdot p^{N+1}-2N\cdot p^{N+2}-3p}{(p-1)^2}]. \qquad (3.40)$$

Як видно на графіку (Рис. 3.6.) вираз (3.40) майже точно збігається з виразом (3.27) при різних розмірах системи.

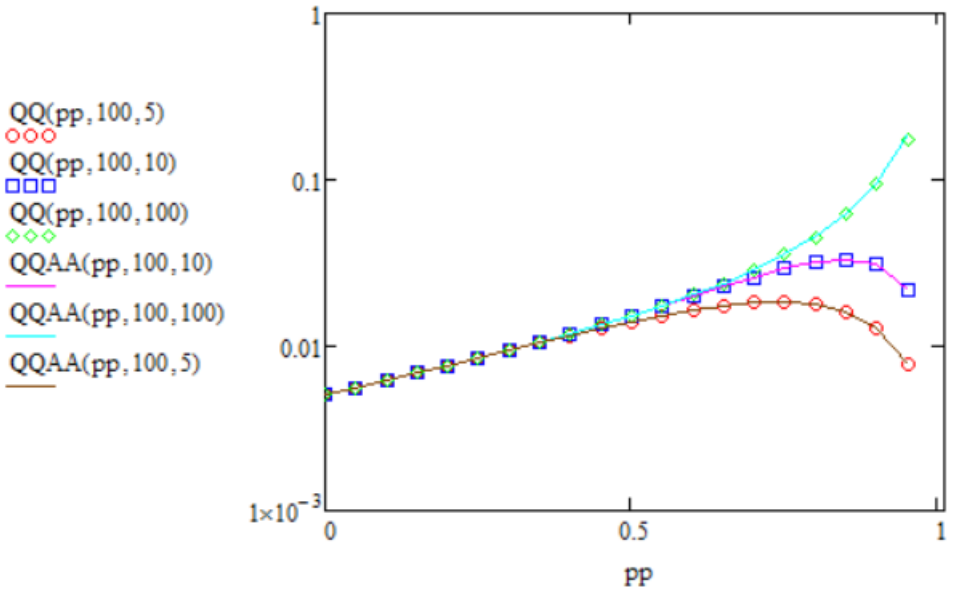


Рис. 3.6. Порівняння виразів (3.27) та (3.40)

У випадку дуже великих N

$$p^N \to 0. \tag{3.41}$$

Тоді, за умови, що $W << L$, можна перетворити вираз (3.40)

$$q \sim 1 - \frac{p^2 - 3p}{(1-p)^2} = \frac{(1-p)^2 - p^2 + 3p}{(1-p)^2} = \frac{(1+p)}{(1-p)}. \tag{3.42}$$

Таким чином, ми отримали вираз (3.31) для кінцевого числа віддзеркалень.

Використовуючи все вищеперелічене, можемо отримати кінцевий вираз для теплового потоку в нанострічках, з урахуванням довжини хвилі і відзеркалень від границі

$$q_{app} = \frac{1}{(p^2 + 2Np^{N+1} - p^{N+2} + 3p^{N+1} - 2Np^{N+2} - 3p)\frac{2L}{W(1-p)^2} + \exp\left(\frac{\pi}{2}\frac{L}{\lambda}\right)}. \tag{3.43}$$

ВИСНОВКИ

Була розв’язана задача про теплопровідності двовимірних наноструктур – нанострічках – в області температур, коли взаємодією фононів між собою можна знехтувати. У цьому, балістичному, режимі, потоки тепла можна обмежити лише взаємодією фононів з границями зразків. В роботі вивчено існуючі механізми взаємодії фононів з границями зразків та їх вплив на теплопровідність тіл. Розроблено модель перенесення тепла фононами в двовимірних структурах у балістичному режимі. Розглянуто низку режимів взаємодії фононів з границями в двовимірних зразках та отримати явні вирази для коефіцієнту теплопровідності в цих режимах. Отримано інтерполяційні співвідношення, які узагальнюють існуючі вираження для коефіцієнта теплопровідності в разі дзеркального і дифузного віддзеркалення від стінок. Запропоновано умови для проведення нових експериментів для перевірки моделей, які запропоновано у дипломній роботі.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Aymeric Ramiere, Sebastian Volz and Jay Amrit, Geometrical tuning of thermal phonon spectrum in nanoribbons, J. Phys. D: Appl. Phys. 49 (2016) 115306 (8pp)
2. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Статистическая Физика. Часть 1
3. Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский, Физическая Кинетика (1979)
4. Д.В.Сивухин, Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика
5. В.Н.Глазков, курс-майнор «Квантовая физика...», лекция 3 v.18.08.2017
6. H. B. G. Casimir, Note on the conduction of heat in crystals, Physica V, no 6 Juni 1938
7. Meera Ramrakhiani, Nanostructures and their applications, Recent Research in Science and Technology 2012, 4(8): 14-19
8. Sanghamitra Neogi and Davide Donadio, Thermal transport in free-standing silicon membranes: influence of dimensional reduction and surface nanostructures, Eur. Phys. J. B (2015) 88: 73
9. Humphrey J. Maris, Heat flow in nanostructures in the Casimir regime, PHYSICAL REVIEW B 85, 054304 (2012)
10. Denis L. Nika, Artur S. Askerov, and Alexander A. Balandin, Anomalous Size Dependence of the Thermal Conductivity of Graphene Ribbons, Nano Lett. 2012, 12, 3238−3244
11. Tom Klitsner, J. E. VanCleve, Henry E. Fischer, and R. O. Pohl, Phonon radiative heat transfer and surface scattering, Physical Review B Volume 38, Number 11 15 October 1988-I
12. M. Asheghi and K. Kurabayashi, R. Kasnavi, K. E. Goodson, Thermal conduction in doped single-crystal silicon films, Journal of Applied Physics Volume 91, Number 8 15 APRIL 2002
13. Olivier Bourgeois, Dimitri Tainoff, Adib Tavakoli, Yanqing Liu, Christophe Blanc, Mustapha Boukhari, André Barski, Emmanuel Hadji, Comptes

Rendus, Reduction of phonon mean free path: From low-temperature physics to room temperature applications in thermoelectricity, Physique Volume 17, Issue 10, December 2016, Pages 1154-1160

14. Nuo Yang, Xiangfan Xu, Gang Zhang, and Baowen Li1, Thermal transport in nanostructures AIP Advances 2, 041410 (2012)
15. Tania Limongi, Luca Tirinato, Francesca Pagliari, Andrea Giugni, Marco Allione, Gerardo Perozziello, Patrizio Candeloro & Enzo Di Fabrizio, Fabrication and Applications of Micro/Nanostructured Devices for Tissue Engineering, Nano-Micro Letters volume 9, Article number: 1 (2017)
16. Miguel-Ángel Sanchez-Martinez, Francesc Alzina, Juan Oyarzo, Clivia M. Sotomayor Torres and Emigdio Chavez-Angel, Impact of the Regularization Parameter in the Mean Free Path Reconstruction Method: Nanoscale Heat Transport and Beyond, Nanomaterials 2019, 9(3), 414;
17. Haoming Luo, Anthony Gravouil, Valentina Giordano and Anne Tanguy, Thermal Transport in a 2D Nanophononic Solid: Role of bi-Phasic Materials Properties on Acoustic Attenuation and Thermal Diffusivity, Nanomaterials 2019, 9(10), 1471;
18. David Lacroix, Karl Joulain, and Denis Lemonnier, Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales, Physical Review B 72, 064305 2005