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

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до дипломної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Моделювання процесів дифузії в складних періодичних потенціалах»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64
Толстокоров Р.В.
спеціальність:
105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма: Комп'ютерна фізика
Керівник:
доктор фізико-математичних наук:
Фертман О.Л.
Рецензент:

Харків – 2020

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
_____ Костянтин НЄМЧЕНКО
підпис

"_____" _____ 2020 року

ЗАВДАННЯ
на дипломну роботу магістра студентові

Толстокоров Роман Володимирович

1. Тема роботи «Використання багатоядерних обчислювальних систем в моделюванні випадкових процесів»

керівник роботи Фертман Олена Леонідівна

затверджені наказом по університету від 06 грудня 2020 № 0210 – 05/2267

2. Строк подання студентом роботи 12 травня 2020 р.

3. Перелік питань, які потрібно розглянути:

Проаналізувати сучасний стан теорії теплопровідності наноматеріалів, проаналізувати існуючи теоретичні моделі, їх властивості та обмеження. Розглянути фізичні механізми, що забезпечують стаціонарний тепловий потік та стаціонарний нерівноважний розподіл температури у фононній системі без взаємодії між фононами. Розробити модель абсолютно дифузного еластичного відбиття фононів; та в рамках цієї моделі розрахувати коефіцієнт теплопровідності. Провести порівняння з існуючими моделями та експериментальними даними.

4.План роботи

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

5. Дата видачі завдання « »_____2020 р

Студент _____ Роман ТОЛСТОКОРОВ

підпис

Керівник роботи _____ Олена ФЕРТМАН

підпис

РЕФЕРАТ

Роман Толстокоров «Моделювання процесів дифузії в складних періодичних потенціалах»
Кваліфікаційна робота магістра з прикладної фізики. – Х.: ХНУ імені В. Н.Каразіна, 2020. – 55 с.

В роботі запропоновано використання методу зображень для обчислення коефіцієнта теплопровідності двовимірних наноструктур. Розроблено і використано модель абсолютного дифузного віддзеркалення фононів від границі провідників тепла, що звело задачу до моделювання процесів дифузії на дискретних періодичних потенціалах. Отримано інтегральне рівняння, яке дає опис всіх можливих граничних співвідношень між довжиною і шириною провідника. Знайдено чисельний розв'язок цього рівняння методом ітерацій. У граничних випадках отримані аналітичні розв’язки, які дозволили знайти інтерполяційні співвідношення, що можуть застосовуватися в проміжних режимах. Проведено порівняння з існуючими моделями і з результатами експериментальних робіт. Запропонована методика дозволила розробити алгоритми для подальшого дослідження інших типів взаємодії фононів з границями провідника.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОСТРІЧКИ, ФОНОНИ, ДИФУЗНЕ ВІДБІТТЯ, КОЕФІЦІЄНТ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ, КОЕФІЦІЕНТ ТЕПЛОВОГО ОПОРУ

РЕФЕРАТ

Роман Толстокоров «Моделювання процесів дифузії в складних періодичних потенціалах»
Квалификационная работа магистра прикладной физики. – Х.: ХНУ имени В. Н.Каразина, 2020. – 55 с.

В работе предложено использования метода изображений для вычисления коэффициента теплопроводности двумерных наноструктур. Разработана и использована модель абсолютного диффузного отражения фононов от границы проводников тепла, что свело задачу к моделированию процессов диффузии на дискретных периодических потенциалах. Получено интегральное уравнение, которое описывает все возможные предельные отношения между длиной и шириной проводника. Найдено численное решение этого уравнения методом итераций. В предельных случаях получены аналитические решения, которые позволили найти интерполяционные соотношения, которые могут применяться в промежуточных режимах. Проводиться сравнения с существующими моделями и с результатами экспериментальных работ. Предлагаемая методика позволила разработать алгоритмы для дальнейшего исследования других типов взаимодействия фононов с границами.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: НАНОЛЕНТЫ, ФОНОНЫ, ДИФФУЗНОЕ ОТРАЖЕНИЕ, КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ, КОФФИЦИЕНТ ТЕПЛОВОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ

ABSTRACT

Roman Tolstokorov “Modeling of diffusion processes in complex periodic potentials”

Qualification work of the Master of Applied Physics. – Kharkiv: V.N. Karazin Kharkiv national university, 2020. – 55 p.

The paper proposes the use of the image method to calculate the thermal conductivity of two-dimensional nanostructures. A model of absolute diffuse reflection of phonons from the boundary of heat conductors was developed and used, which reduced the problem to modeling diffusion processes at discrete periodic potentials. An integral equation is obtained that describes all possible limit relations between the length and width of the conductor. A numerical solution of this equation is found by the iteration method. In extreme cases, analytical solutions were obtained that made it possible to find interpolation relations that can be used in intermediate modes. Comparisons are made with existing models and with the results of experimental work. The proposed methodology allowed us to develop algorithms for further study of other types of phonon interaction with boundaries.

KEYWORDS: NANO-RIBBONS, PHONONES, DIFFUSION REFLECTION, HEAT CONDUCTIVITY COEFFICIENT, THERMAL RESISTANCE COEFFICIENT, THERMAL CONDUCTANCE

ЗМІСТ

ВСТУП……....8
РОЗДІЛ 1. ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА НА НАНОМАСШТАБАХ……...10
1.1. Модель Казимира……..12
1.2. Вплив зміни геометрії пластини на фононне розсіяння……...18
1.3. Приклади числових обчислень……21
1.4. Фізичні основи моделі Казимира……....24
РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЬ ЕЛАСТИЧНОГО ДІФУЗНОГО РОЗСІЮВАННЯ……...26
2.1. Постановка проблеми……...27
2.2. Абсолютно поглинаюча границя…….29
2.3. Абсолютно дифузне пружне відбиття…….32
2.4. Ітераційне рівняння для розподілу температури……...33
2.5. Інтегральне рівняння для розподілу температури…….37
2.6. Висновок……40
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ КОЕФІЦІЄНТА ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ……42
3.1. Баланс теплового потоку…….42
3.2. Коефіцієнт ефективної теплопровідності……..44
3.3. Коефіцієнт температурного кондактанса у тривимірному випадку……...49
3.4. Коефіцієнт теплопровідності у двовимірному випадку……...51
ВИСНОВКИ …….……...53
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ……...54

ВСТУП

Актуальність теми. Тепловий транспорт у двовимірних матеріалах – наноплівках, нанострічках, мембранах, графенах, тощо – привертає все більше увагу завдяки фундаментальному характеру питань, що виникають, та практичному значенню для забезпечення теплового енергетичного балансу в нанорозмірних пристроях Однією з проблем, яка виникає при вивченні теплопровідності фононних систем з низькою розмірністю при низьких температурах, є поява розбіжності у виразах щодо коефіцієнта теплопровідності як функції від розміру зразка, а також незвичайні залежності потоків тепла від градієнтів температури. Наприклад, у загальноприйнятій моделі Казіміра – Займана передбачається, що зовнішні джерела створюють лінійний градієнт температури на бічній поверхні. Більше того, у моделі Казимира дві умови на границях є необхідними. Це дифузне відбиття, в якому фонон відбивається з ізотропною функцією кутового розподілу. Друга умова – це перерозподіл фононів за енергією, так що розподіл відбитих фононів відповідає випромінюванню абсолютно чорного тіла – тобто відбиття фононів повинно бути нееластичним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою меж з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за умови теплового контакту між бічними краями зразка і тепловими середовищами, і з заданим розподілом температури.

У цій роботі вивчається еластичний ізотропний дифузійний механізм розсіювання фононів на межах зразка кінцевих розмірів у двовимірному випадку та його вплив на теплопровідність зразка. Запропоновано аналітичну модель теплопровідності двовимірного фононного газу у двовимірних зразках кінцевих розмірів.

Основна **мета** роботи – розглянути фізичні механізми, що забезпечують стаціонарний тепловий потік та стаціонарний нерівноважний розподіл температури у фононній системі без взаємодії між фононами. Зокрема,

пропонується модель ефективного абсолютного дифузного розсіювання та проводиться порівняння з існуючими моделями та експериментом.

Для досягнення поставленої мети визначені **задачі**:

– проаналізувати сучасний стан теорії теплопровідності наноматеріалів, проаналізувати існуючи теоретичні моделі, їх властивості та обмеження;

– розробити модель абсолютно дифузного еластичного відбиття фононів;

– в рамках запропонованої моделі розрахувати коефіцієнт теплопровідності, провести порівняння з існуючими моделями та експериментальними даними.

Об’єкт дослідження – теплові властивості наноматеріалів.

Предмет дослідження – теплопровідність двовимірних наноструктур, яка зумовлена транспортом фононів в балістичному режимі в обмеженій геометрії.

Методи дослідження. Теоретичні положення роботи базуються на математичних методах фізичної кінетики, які застосовуються для опис перенесення тепла фононами в твердих тілах в балістичному режимі.

Наукова новизна одержаних результатів.

– розроблено модель еластичного, абсолютно дифузного відбиття фононів від границі провідника тепла в двовимірних матеріалах.

– проведено порівняння з існуючими моделями і визначено недоліки та обмеження цих моделей.

Практичне значення отриманих результатів:

– здобуто прості аналітичні інтерполяційні формули для коефіцієнта теплопровідності, які узагальнюють існуючі вирази.

– запропоновано методика методу зображень, яка дозволяє розробити алгоритми для подальшого дослідження різних типів взаємодії фононів з границями провідника.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків та списку використаних джерел. Загальний обсяг роботи становить 54 сторінки, із них основного тексту 43 сторінки, 18 рисунків за текстом, список використаних джерел із 20 найменувань на 2 сторінках.

РОЗДІЛ 1. ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА НА НАНОМАСШТАБАХ (ОГЛЯД)

Розвиток нанотехнологій призвів до безпрецедентного зменшення розміру електронних та механічних пристроїв. Наприклад, вже широко використовуються транзистори розміром декілька нанометрів. Тепло, яке розсіюється при роботі цих пристроїв через ефект Джоуля скоро досягне рівня тепла, що розсіюється в лампочці розжарювання. Цей високий рівень об'ємного розсіювання тепла в електронних пристроях повинен зменшуватися дуже ефективно, щоб уникнути можливих збоїв систем. Для рішення цієї задачі необхідне точне знання явищ, що зумовлюють перенесення тепла на наномасштабах.

Крім того, на основі нових технологій локального нагріву, розробляються методи збільшення ємності жорстких дисків комп'ютерів. Головна мета цієї задачі є запис байта інформації на атомних масштабах. Зараз вже є можливість реалізувати цю задачу за допомогою електронних мікроскопів близького поля., але цей процес є дуже повільним. Тому необхідно навчитися прискорювати процеси нагріву та охолодження. В цьому разі теплопередача повинна регулюватися не тільки на нанометровій шкалі, але й на наносекундній шкалі. Через ці два приклади можна передбачити, що при мініатюризації розробникам доведеться вирішувати все більше проблем теплопередачі за короткий час та малий розмір у просторі.

Однак у фізиці перенесення тепла зазвичай розглядається в рамках закону Фур’є, який можна застосовувати тільки для певних розмірів та характерних часів. При типових для нанотехнологій просторових та часових масштабах необхідні для застосування цього закону умови порушуються.

З іншої сторони, теплопровідність описується законом Фур’є, який фактично є рівнянням дифузії. Добре відомо, що це рівняння можна трактувати як випадкові блукання ходу частинок. У випадку теплопровідності, ми фактично маємо справу з носіями енергії, які є електронами в металах і

фононами в кристалічному матеріали. Коли ці носії проходять велику кількість зіткнень, використання рівняння дифузії справедливо, тоді як потрібно більш ретельне дослідження, коли кількість актів взаємодій між носіями зменшується, або, взагалі відсутня.

У середині 20 століття великі теоретичні зусилля було зроблено для визначення часу релаксації фононів в об’ємних (3D) матеріалах. При температурі навколишнього середовища було показано, що основний внесок у час релаксації дає ангармонічна фононна взаємодія.

У випадку достатньо низьких температур або малих розмірів, взаємодія між фононами стає не визначальною. У цих випадках основний внесок в теплопровідність вносять взаємодія зі границями, дефектами кристалічної гратки, дефектами, та шорсткості стінок зразка

У теплопровідності кремнію також переважає фононний транспорт, навіть за наявності великих концентрацій вільних носіїв заряду [11]. Теплопровідність кремнієвих двовимірних шарів є значно меншою у порівнянні з об’ємним кремнієм за рахунок механізмів розсіювання, які відсутні в об’ємному матеріалі. Особливо фононне граничне розсіювання важливо при низьких температурах, де середній вільний шлях є довільно великими. Також важливим є розсіювання фононів на недосконалостях граткі, такі як вакансії та дефекти, які зявляються під час процесів виготовлення наноплівок. Домішки та пов'язані з ними вільні носії у легованому кремнію також знижують теплопровідність порівняно зі значенням об’ємного кремнію. Доступні дані про теплопровідність для вирощених легованих полісиліконових плівок з використанням хімічного осадження пари показують зменшення на більше ніж 80% порівняно з показниками для монокристалічного внутрішнього кремнію. Це пояснюється головним чином розсіюванням фононів на межі зерна полісиліконових плівок.

У цій роботі ми вивчаємо еластичний ізотропний дифузійний механізм розсіювання фононів на межах зразка кінцевих розмірів у двовимірному випадку та його вплив на теплопровідність зразка. Запропоновано аналітичну модель теплопровідності двовимірного фононного газу у двовимірних зразках

кінцевих розмірів. Основна мета роботи - розглянути фізичні механізми, що забезпечують стаціонарний тепловий потік та стаціонарний нерівноважний розподіл температури у фононній системі без взаємодії між фононами. Зокрема, пропонується модель ефективного абсолютного дифузного розсіювання та проводиться порівняння з існуючими моделями.

1.1. Модель Казимира

Найбільш загальну формулу для коефіцієнтта теплопровідності крисатів у тривимірному випадку запропонував Казимиром у 1938 р.

У серії експериментів, проведених між 1935 та 1938 де Хаас та Бірмас виявили, що при низьких температурах (як правило, нижче 10 К) теплопровідність високоякісних діелектричних кристалів стає залежним від обсягу вибірки. Пейерс у листі до де Хааса, запропонував що такий ефект може бути пов'язаний з «відбиванням пружних хвиль від стінок стрижня ». Ця ідея була докладніше розкрита Казимиром у 1938 р. При низьких температурах важливі лише акустичні довгохвильові фонони. Казимир показав, що провідність можна записати як

$$k = \frac{1}{3} C V^2 \Lambda_c \qquad (1.1)$$

де C – теплоємність, а v – відповідно середня швидкість фонону,

Якщо швидкість звуку є ізотропною і не залежить від частоти фононів і задається як

$$\langle \upsilon \rangle = \frac{\frac{1}{\upsilon_l^2} + \frac{2}{\upsilon_t^2}}{\frac{1}{\upsilon_l^3} + \frac{2}{\upsilon_t^3}} \qquad (1.2)$$

де v_l і vt – повздовжні і поперечні швидкості фононів відповідно. Казимир виявив, що у циліндричному стрижні радіусом R ефективним середнім вільним шляхом є

$$\Lambda_c = 2R \tag{1.3}$$

Для стрижня квадратного перерізу зі стороною D результат

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

Зауважимо, що рівняння (3) та (4) базуються на припущенні, що розсіювання на поверхні зразка ідеально розсіяне, тобто фонон, що потрапляє на поверхню зразка, відбивається у випадковому напрямку.

Рівняння (1.3) і (1.4) виконуються, 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 макроскопічних зразків така ситуація виникає лише при низьких температурах. Однак для наноструктури розсіяння на межі важливе при більш високих температурах і для досить малих зразків електропровідність буде залежати від розмірів навіть при кімнатній температурі. Можна зробити приблизну оцінку необхідного для цього розміру.

Наприклад, якщо для кремнію візьмемо середню швидкість фонону за швидкість Дебая [5700 *м*/*с*], кінетична формула передбачає середню довжину вільного пробігу в об'ємній вибірці при кімнатній температурі 47 *нм*. Таким чином аби опинитися в режимі Казимира розміри зразка повинні бути меншими. Цей ефект було досліджено експериментально у різних наноструктурних зразках. Експериментальна робота ускладнюється можливою наявністю дефектів усередині матеріалу. Більшість теоретичних робіт розглядає фонон у рівнянні Больцмана з наближенням до термнів зіткнення. Наприклад, розсіювання фононів на ізотопах часто прийнято вважати прямо пропорційними чверті потужності фононної частоти, хоча це є правильним лише для частот, значно нижчих від дебаєвської частоти. У більшості випадків за спрощена форму для фонону прийняте дисперсійне відношення. Однак при кількісному розрахунку провідності потрібно враховувати відношення дисперсії фононів. Розрахунки також були зроблені з використанням

молекулярної динаміки, але такі розрахунки повинні бути скорегованими для квантових ефектів.

Вважається що тепловий потік направлений уздовж стрижня з віссю в *z*. Стрижень простягається від $z = -\infty$ до $z = \infty$. Беремо розсіювання фононів на стінах ідеальним, так що стінки являють собою «чорні тіла». Таким чином, швидкість, з якою випромінюється енергія з поверхні елемента площі *dA* задається числом

$$\frac{1}{8\pi^3}\sum_j \iiint \vec{\upsilon}_{\vec{k}j}\hat{n}\, v_{\vec{k}j}(T)\hbar\omega_{\vec{k}j}k^2\, dk\, d\cos\theta\, d\varphi\, dA \tag{1.5}$$

де *n* - одиничний вектор, нормальний до поверхні, v_{kj} - групова швидкість фонона з хвильовим вектором *k* і поляризація *j*, і n_{kj} - це число окупації для цього фонону.

Інтеграли знаходяться на всьому *k* просторі, що підлягає умові, щоб v_{kj} – n були позитивними. Нехай kj - відстань, яка фонон kj рухається в напрямку z до того, як поглинеться біля стінки зразка (Рис. 1). Для того щоб отримати загальний вираз для провідності, зручно розглянути випадок, при якому розподіл температури вздовж трубки є

$$T(z) = T_0 + \Delta T(z) \tag{1.6}$$

де T (z) = *a* δ (z) і a - деякий коефіцієнт. Потім сітка швидкість втрат тепла, що виникає з області, близької до z = 0, становить

$$\frac{1}{8\pi^3}\oint dl\sum_j \iiint \vec{v}_{\vec{k}j}\cdot\hat{n}\, a\frac{\partial n_{\vec{k}j}(T)}{\partial T}\hbar w_{\vec{k}j}\, dk\, d\cos\theta\, d\varphi$$

$$¿\frac{a\hbar^2}{8\pi^3 kT_0^2}\oint dl\sum_j \iiint \vec{v}_{\vec{k}j}\cdot\hat{n}\, n_{\vec{k}j}\left(n_{\vec{k}j}+1\right)w_{kj}^2 k^2\, dk\, d\cos\theta\, d\varphi \tag{1.7}$$

де інтеграл лінії знаходиться навколо окружності стрижня, і ми використали відношення

$$\left.\frac{\partial n_{ij}}{\partial T}\right|=\frac{\hbar w_{\vec{k}j}}{kT_0^2}n_{\vec{k}j}\left(n_{\vec{k}j}+1\right) \tag{1.8}$$

Фонон, що залишає положення z = 0 з хвильовим вектором k і поляризація j буде поглинена в положенні z = kj і буде сприяти збільшенню тепла в цьому положенні. Таким чином, якщо Q (z) - тепло на одиницю відстані в положенні z, маємо

$$\frac{dQ(z)}{dt}=\frac{a\hbar^2}{8\pi^3 kT_0^2}\oint dl\sum_j\iiint \vec{v}_{\vec{k}j}\cdot\hat{n}\,n_{\vec{k}j}\left(n_{\vec{k}j}+1\right)w_{kj}^2\delta\left(z-\Lambda_{\vec{k}j}\right)k^2\,dk\,d\cos\theta\,d\varphi \tag{1.9}$$

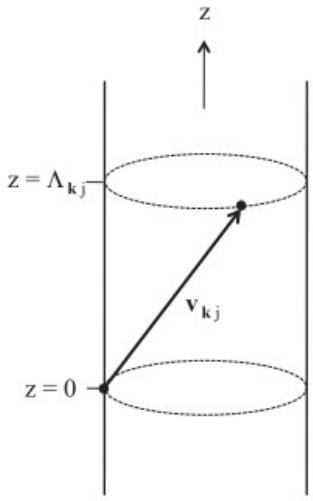


Рис.1.1. Схема стрижня, в якому фонон залишає крапку на стіна при z = 0 і рухається з груповою швидкістю v kj, поки не вдарить
ще одна точка на стіні з z = kj.

З цього випливає це

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}Q(z)z^2\,dz=\frac{a\hbar^2}{8\pi^3 kT_0^2}\oint dl\sum_j\iiint \vec{v}_{\vec{k}j}\cdot\hat{n}\,n_{\vec{k}j}\left(n_{\vec{k}j}+1\right)w_{kj}^2\delta\left(z-\Lambda_{\vec{k}j}\right)k^2\,dk\,d\cos\theta\,d\varphi \tag{1.10}$$

Тепер ми отримаємо вираз для тієї ж похідної на основі макроскопічних рівнянь, що регулюють тепловий транспорт.

Розглянемо площину, яка лежить перпендикулярно напрямку до стрижню і проходить через положення z. Нехай J (z) – це швидкість, з якою тепло протікає через цю площину за одиницю часу. З закону Фур'є,

$$J(z)=-kA\frac{\partial \delta T}{\partial z} \tag{1.11}$$

де δT (z) = T (z) - T0, а A - площа поперечного перерізу стрижня. Але

$$\frac{\partial Q(z)}{\partial t}=\frac{\partial J}{\partial z} \tag{1.12}$$

Тому

$$\frac{\partial Q(z)}{\partial t}=kA\frac{\partial^2 \delta T}{\partial z^2} \tag{1.13}$$

Отже,

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} Q(z)z^2\,dz=kA\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2 \delta T(z)}{\partial z^2}z^2\,d=-2kA\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial \delta T(z)}{\partial z}z\,dz=¿2kA\int_{-\infty}^{\infty}\delta T(z)\,dz \tag{1.14}$$

У цій деривації факт, що δT дорівнює нулю при z = ± ∞. Останній інтеграл у правій частині цього рівняння повинен бути постійним. Звідси випливає, що ми можемо використовувати початкову умову (1.6) для оцінки цього інтеграла. Тому

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} Q(z)z^2\,dz=2Aka \tag{1.15}$$

Потім, порівнюючи рівняння (1.10) та (1.15) отримаємо

$$k=\frac{\hbar^2}{16\pi^3 kT_0^2}\oint dl\sum_j\iiint \vec{v}_{\vec{k}j}\cdot\hat{n}\,n_{\vec{k}j}\left(n_{\vec{k}j}+1\right)\Lambda_{\vec{k}j}^2 w_{\vec{k}j}^2 k^2\,dk\,d\cos\theta\,d\varphi \tag{1.16}$$

Ми спочатку розглянемо результати цієї формули, якщо всі фонони мають однакову швидкість v, незалежно від поляризації, напрямку поширення чи величини хвилі вектору. Узагальнення з урахуванням різних швидкостей

поздовжніх та поперечних фононів, але все ще зберігаються ізотропія, прямолінійна. Середній вільний шлях Казимира є

$$\Lambda_c = 3k/Cv \qquad (1.17)$$

Для стрижнів циліндричного та квадратного поперечного перерізу, рівняння (1.16) і (1.17) призводять до результатів, отриманих Казимиром. (1.3)та (1.4)].

Знайти k для прямокутника зі сторонами D (товщина) і W (ширина), і - нескінченна довжина вздовж z напрямку. Результат

$$\Lambda_c = \frac{Dn^{1/2}}{4}\{3n^{\frac{1}{2}}\ln\ ¿ \qquad (1.18)$$

Середній вільний шлях Казимира має логарифмічний характер та розходиться, коли ширина пластини переходить до нескінченності. Обмежувальною формою є

$$\Lambda_c = \frac{2}{4}D\left[\ln 2 + \frac{1}{2} + \ln\left(\frac{W}{D}\right)\right] = D[0.895 + 0.75\ln\left(\frac{W}{D}\right)] \qquad (1.19)$$

Це розходження походить від фононів, які розповсюджуються майже по всій площині пластини, тобто в площині, нормальній до товщини, і тому може мати дуже великі значення| k j |. Це показано варіацію C із шириною пластини на рис. 2.

З результату рівняння (1.18) видно, що за умов Казимира - теплопровідність теплового потоку розглядається вздовж *A,* плита не може вважатися функцією просто товщини пластини; ширина також відіграє певну роль. Було заявлено що довжина вільного пробігу Казимира для теплового потоку вздовж пластини дорівнює вдвічі більшій товщині.

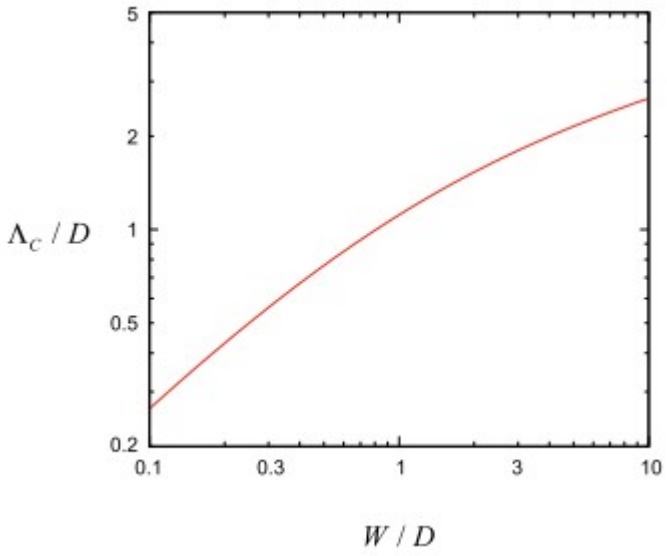


Рис.1.2.Розрахункова довжина Казимира для теплового потоку уздовж прямокутної пластини з розмірами поперечного перерізу D і W.

1.2. Вплив зміни геометрії пластини на фононне розсіяння

Розглянемо що відбувається з розбіжністю, коли пластина вигнута. Є два випадки до розгляду. Спочатку розглянемо тарілку, яка має нескінченну ширину і яка зігнута вздовж напрямку, в якому тече тепло. Таким чином, напрямок теплового потоку повільно змінюється з положенням. Це можна сформулювати методом, подібним до використовуваного підходу, вивести рівняння (16). Ми припускаємо, що плита зігнута так, що зовнішній радіус - r1, а внутрішній - r2. Розглянемо плиту, як частиу затрубки. Тоді можна показати, що

$$k = \frac{\hbar^2}{16\pi^3 k T_0^2 \ln\left(\frac{r_1}{r_2}\right)} \left\{ r_1 \sum_j \iiint \vec{v}_{\vec{k}j} \hat{n} \omega_{\vec{k}j}^2 n_{\vec{k}j}^{\cdot} \left(n_{\vec{k}}+1\right) \theta_{\vec{k}j}^2 d^3\vec{k} + r_2 \sum_j \iiint \vec{v}_{\vec{k}j} \hat{n} \omega_{\vec{k}j}^2 n_{\vec{k}j}^{\cdot} \left(n_{\vec{k}j}+1\right) \theta_{\vec{k}j}^2 d^3\vec{k} \right.$$

(1.20)

де θkj - кут, під яким рухається фонон kj, а решта позначень така сама, як у

рівнянні (1.16). Для великих значень радіуса кривизни R числові результат добре наближені наступним виразом

$$\Lambda_c = D[1.29 + 0.385 \ln\left(\frac{R}{D}\right)] \qquad (1.21)$$

R → ∞, C розходяться логарифмічно, як і очікувалося від рівняння за формулою для плоскої пластини (1.19).

В якості другої геометрії ми розглядаємо тепловий потік у плиті яка вигнута навколо напрямку теплового потоку, тобто z приймаємо за вісь. Ця геометрія може вважатися окремим випадком більш загальної проблеми, а саме надходження тепла вздовж A порожнистого циліндра (1.24).

Нехай зовнішній і внутрішній радіуси циліндра r1 і r2 відповідно. Розглянемо фонон, що залишає зовнішню

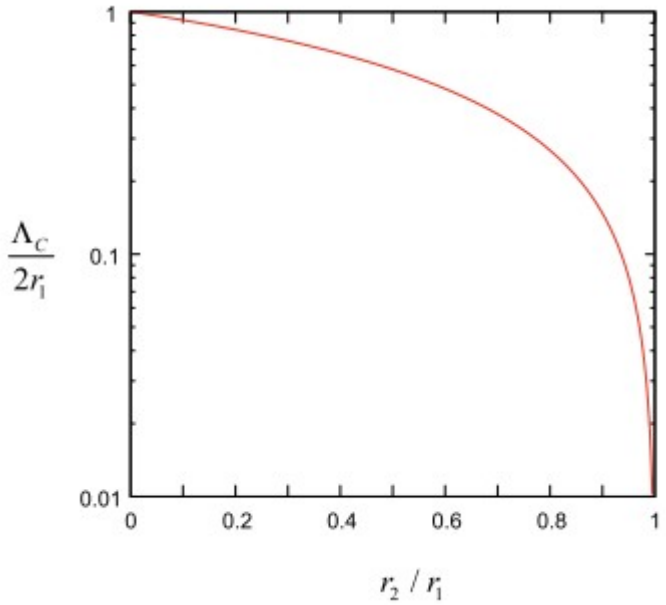


Рис. 1.3. Розрахункова довжина Казимира для теплового потоку уздовж циліндра радіусом r1 з отвором діаметром r2.

поверхню в положенні (r1, 0, 0) з напрямком θ, φ. Цей фонон вразить внутрішню стінку, якщо r2> r1 | sin φ |, в цьому випадку

$$\Lambda_{\tilde{k}j} = ¿ \qquad (1.22)$$

Якщо r2 <r1 | sin φ | фонон потрапляє на зовнішню стінку і

$$\Lambda_{\vec{k}j}=2r_1\cos\varphi\cot\theta \qquad (1.23)$$

Фонон, що залишає внутрішню стінку, завжди потрапляє на зовнішню стінку і

$$\Lambda_{\vec{k}j}=\left[\left(r_1^2-r_2^2\sin^2\varphi\right)^{\frac{1}{2}}-r_2\cos\varphi\right]\cot\theta \qquad (1.24)$$

Підміна цих результатів рівнянням (1.16) та інтегруючи по θ і φ, отримуємо

$$\Lambda_c=\frac{2r_1}{1-\beta^2}\{1-\frac{3\beta}{4}+\frac{3\beta^3}{4}-\frac{1}{2}¿$$

$$\left(1-\beta^2\right)E\left(\beta^2\right)-\left(1-\beta^2\right)K\left(\beta^2\right)\} \qquad (1.25)$$

де β = r2 / r1, а K і E - повні еліптичні інтеграли першого і другого роду. На малюнку 3 показано C як функці. r2 / r1. Ми можемо використовувати цей загальний вираз, щоб знайти провідність тонкої вигнутої пластини товщиною Di і радіусом кривизни R. Для цього задаємо r1 = R + D / 2, і r2 = R - D / 2 і візьмемо межу рівняння. (1.25), коли D = R.

Після алгебраїчних перетворень

$$\Lambda_c=D¿ \qquad (1.26)$$



Рис. 1.4. Принципова схема, що показує ефект згинання пластини при поширення фононів. Суцільна лінія являє собою стіни а пунктирна лінія показує можливу траєкторію фонона.

$$E(\beta^2)=1+¿$$

$$K(\beta^2)=\ln\frac{4}{\gamma}+\left(\frac{1}{4}\ln\frac{4}{\gamma}-\frac{1}{4}\right)\gamma^2+¿¿ \quad (1.27)$$

З рівнянь (19), (21) та (26) випливає, що це може бути, що можливо внести зміни в теплопровідність А шляхом згинання пластини. Складність полягає в тому, що отримані результати тримаються суворо в межах, що розсіювання відбувається усюди окрім меж. Це вірно якщо електропровідність стає нескінченною, коли немає кривизна. Фононне розсіювання в межах обсягу матеріалу зрізає логарифмічну розбіжність.

Другий розгляд полягає в тому, що при зігнутій пластині виникає неоднорідне статичне напруження. На увігнутій стороні буде напруга стиску, а розширення з протилежного. Наслідком цього є те, що відношення дисперсії фононів буде тепер залежати від положення, і фонон, що перетинає пластину, буде мати змінний напрямок поширення (ефект міражу рис. 1.4).

Оскільки швидкість звуку зазвичай збільшується при стисненні, цей ефект посилює зміни в електропровідності, яка виникає саме через зміну геометрія.

1.3. Приклади числових обчислень

Для виконання інтеграла в рівнянні (1.16), ми використано велику кількість випадково вибраних хвильових векторів, як правило 300 000. На рис. 5 і 6 показано результати вимірів для теплової провідність пластин Si та GaAs. Товщина пластини становить 30 нм. Для пластин з однаковим співвідношенням товщини D до ширини W, провідність повинна бути пропорційною D. З цього випливає, що провідність повинна задовольняти співвідношенню

$$k(D,W)=\frac{W}{D}k(D,\frac{D^2}{W}) \quad (1.28)$$

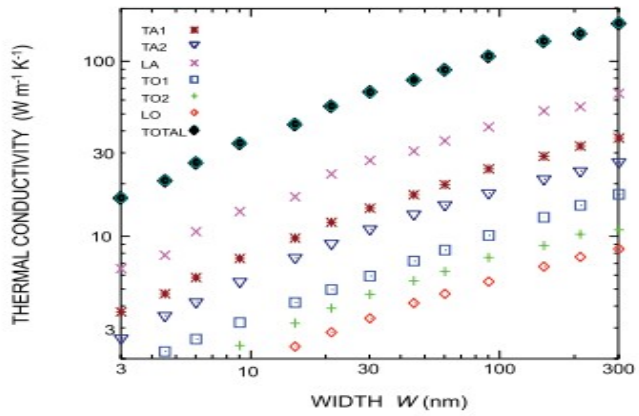


Рис. 1.5. Розрахована теплопровідність к для тепла вздовж прямокутної пластини як функція від ширини W.

Найбільший внесок у теплопровідність роблять поздовжні акустичнц фонони. Як можна очікувати, оптичні фонони вносять дуже малий внесок.

Для квадратного поперечного стержня Si провідність дорівнює 66 Вт м − 1 К − 1. Питома теплоємність Si становить 1,66 × 106 Дж m −3 K − 1.

Таким чином, для того, щоб рівняння (1.1) разом з рівнянням (1.4) описали поздовжні акустичні та оптичні фонони показані окремо

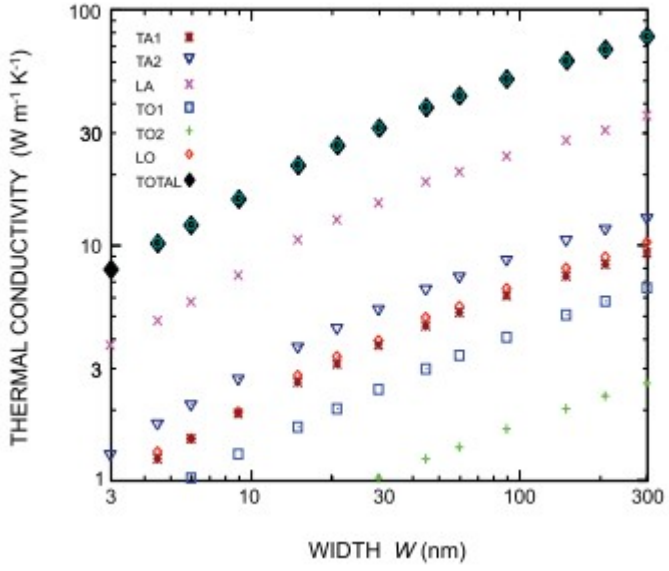


Рис.1.6. Розрахована теплопровідність к для теплового потоку уздовж прямокутної пластини як функція від ширини.

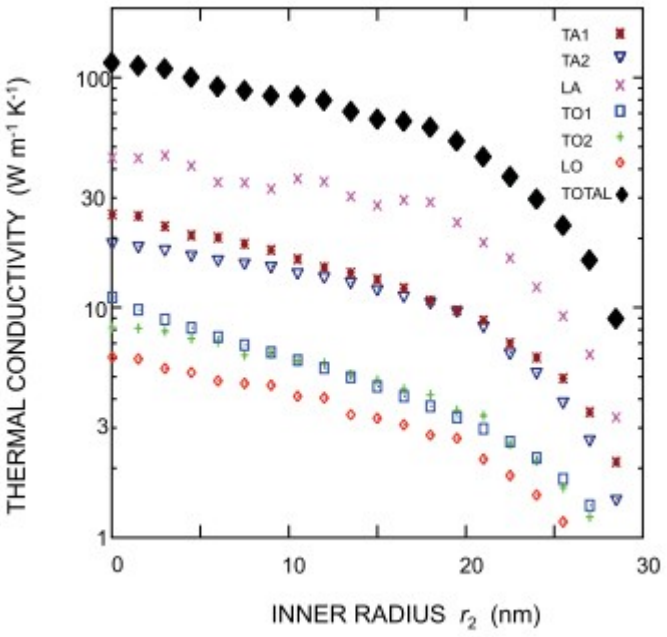


Рис. 1.7. Розрахована теплопровідність к для тепла потік вздовж циліндра радіусом r1 = 30 нм з отвором радіусу r2.

результати числових обчислень, ефективне середнє значення швидкість введення в рівняння (1.1) має бути v = 3600 м с − 1. В результаті фононної дисперсії ця швидкість значно менша ніж швидкість звуку в Si. Наприклад, поздовжні і поперечні швидкості звуку в напрямку [100] Si є

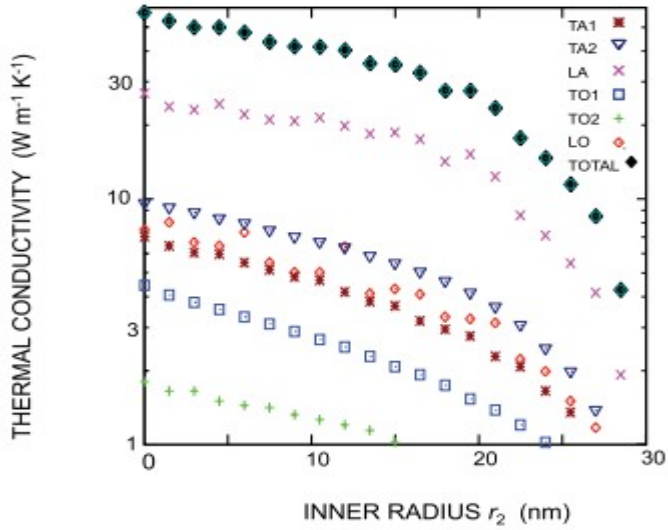


Рис. 1.8.Розрахована теплопровідність к для теплового потоку вздовж циліндра радіусом r1 = 30 нм з отвором радіуса r2.

8400 м s − 1 і 5200 m s − 1 відповідно. Відповідно середня швидкість для GaAs виявляється 1700 м с − 1.

Результати, показані на рис. 5 і 6 ґрунтуються на припущенні, що існує незначний фонон розсипання в основній масі матеріалу. Основна маса теплової провідності Si становить 141 Вт − 1 К – 1.

1.4. Фізичні основи моделі Казимира

У чистих діелектричних монокристалах при низьких температурах фонони розсіюються лише на поверхні кристалів. Теплоперенос у цих умовах вперше обговорив Казимир. Він розглядав довгий вузький зразок із ідеально шорсткими поверхнями, які розсіяно кожен падаючий фонон. Це дослідження стосується кристалів, що мають дуже дзеркальні (дзеркальні) поверхні, на яких фонони розсіяно дифузно лише з невеликою ймовірністю f. Ця окулярність (1 f) збільшить теплову провідність зразка. Ми представляємо наші результати вимірювань теплопровідності на чистих монокристалах полірованого кремнію та аналізуємо ці результати з точки зору випромінювання чорного тіла фононом. Наша мета полягає в тому, щоб зрозуміти транспорт теплоти в цих полірованих кристалах і визначити дифузну ймовірність розсіювання f з наших вимірювань теплопровідності. У попередньому дослідженні висока чутливість дифузного розсіювання фононів до поверхневого забруднення була продемонстрована якісно. Тут ми покажемо, що вимірювання теплопровідності можна використовувати як точний кількісний інструмент для вивчення поверхневих дефектів та адсорбатів у діапазоні температур від 0,05 до 1 К, що відповідає діапазону домінуючих частот фононів від -5 до —100 6 Гц . Ми отримуємо прямі результати для ймовірності дифузного розсіювання як температури, f (T), для полірованих поверхонь кристалічного кремнію в цьому фононному діапазоні частот. Ці фононні частоти недоступні за допомогою типових методів ультразвуку, теплового імпульсу або надпровідних методів з'єднання тунелів.

Інші методи генерації та виявлення фононів також мають обмеження у діапазоні частот та / або типах кристалів, які можуть бути використані.

Це дослідження також служить цілі більш загального інтересу, а саме - демонстрація ефектів геометрії зразка та чорних (випромінювання = 1) або сірих (емісійність (1) об'єктів на поширення випромінювання чорних тіл. Хоча велика робота вже є що було зроблено в галузі передачі випромінювання фотонів, є кілька переваг при проведенні теоретичних та експериментальних досліджень фононного випромінювання замість фотонного випромінювання. Фонони в діелектричних кристалах не перетворюються на інші збудження, в той час як фотони будуть «розпадатися» в тепло (фонони) при взаємодії з речовиною Ще одна перевага експериментів з фоновим випромінюванням теплопередачі полягає в тому, що кристал забезпечує порожнину, обмежену інтерфейсом з непровідним середовищем, щоб фонони повністю містилися в кристалі. Такий експериментальний контроль неможливий при фотоні експерименти з радіаційним переміщенням тепла. При аналізі наших експериментів додаткова складність еластичного анізотра Опій для фононного випромінювання легко враховується за допомогою методів Монте-Карло, про які піде мова пізніше.

РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЬ ЕЛАСТИЧНОГО ДІФУЗНОГО РОЗСІЮВАННЯ

Однією з проблем, яка виникає при вивченні теплопровідності фононних систем з низькою розмірністю при низьких температурах, є поява розбіжності у виразах щодо коефіцієнта теплопровідності як функції від розміру зразка [1 - 4], а також зовнішній вигляд незвичних залежностей потоків тепла від градієнтів температури [2, 5].

Наприклад, у загальноприйнятій моделі Казіміра – Займана [6, 7] передбачається, що зовнішні джерела створюють лінійний градієнт температури на бічній поверхні. Більше того, у моделі Казимира дві умови на кордоні є необхідними. Це дифузне відбиття, в якому фонон відображається із ізотропною функцією кутового розподілу. Друга умова - це перерозподіл фононів за енергією, так що розподіл відбитих фононів відповідає випромінюванню абсолютно чорного тіла - тобто відбиття фононів повинно бути нееластичним. І якщо перша умова може бути досягнута, наприклад, за допомогою меж з певним ступенем шорсткості, то друга умова може бути досягнута лише за умови теплового контакту між бічними краями зразка і тепловими середовищами, і з заданою розподіл температури. У випадку з термоізольованими межами зразка (наприклад, коли зразок знаходиться у вакуумі) або, принаймні, при недосконалому тепловому контакті, другий стан майже неможливий.

У цьому роділі ми вивчаємо стаціонарний нерівноважний стан фононної системи, який забезпечується лише взаємодією фононів із бічними межами зразків. У цьому випадку взаємодія фононів між собою вважається незначною, а бічні межі зразка вважаються термічно ізольованими.

Основна мета димлому – аналітичне дослідження фононного випромінювального перенесення тепла у двовимірних провідниках та його залежності від взаємодії з ребрами провідника при абсолютно ізотропному дифузійному розсіянні, тобто при повній відсутності зеркального розсіювання . Таке викладення проблеми узагальнює, зокрема, результати роботи [9,10] до

двовимірного випадку і дає змогу вирішити проблему не лише числовими методами [9] та [10], але й для отримати аналітичні результати.

2.1. Постановка проблеми

Як об'єкт дослідження розглянемо фононну систему прямокутної двовимірної смуги шириною W і довжиною L (Рис. 2.1). Для простоти ми розглядаємо тільки поздовжні фонони і не враховуємо згинальних коливань і поперечних фононів. Для такої системи введемо двовимірні щільності енергії

$$E=\int \hbar\omega n(T)d\Gamma \tag{2.1}$$

Тут ω = ω (k) - співвідношення енергії і імпульсу для фонона, $n(T)$ - функція розподілу фононів і

$$d\Gamma=\frac{d^2k}{(2\pi)^2}=\frac{dk_x dk_z}{(2\pi)^2} \tag{2.2}$$

двовимірний фазовий об'єм. Двовимірна щільність теплоємності (при постійній площі) може бути визначена наступним чином

$$C_S=\frac{\partial E}{\partial T}|_S=\int \hbar\omega \frac{\partial n(T)}{\partial T}d\Gamma \tag{2.3}$$

Як теплового потоку ми розглядаємо двовимірний тепловий потік

$$Q=\int \hbar\omega v_{gr} n(T)d\Gamma \tag{2.4}$$

Значення $\boldsymbol{Q}$ являє собою потік енергії за одиницю часу і через одиницю довжини і має розмірність *Вт / м*. Величина v_{gr} - групова швидкість фононів

$$v_{gr}=\frac{\partial\omega}{\partial k}k \tag{2.5}$$

У рівняннях (1) - (5) фонони різних поляризацій можуть бути враховані у разі потреби.

Як джерела тепла, ми розглядаємо резервуари з нескінченною теплоємністю з заданими температурами: гарячий з температурою T_h і холодний з температурою T_c, які знаходяться в тепловому контакті з торцями H_0H_1 і C_0C_1 (див. Рис. 2.1), відповідно.

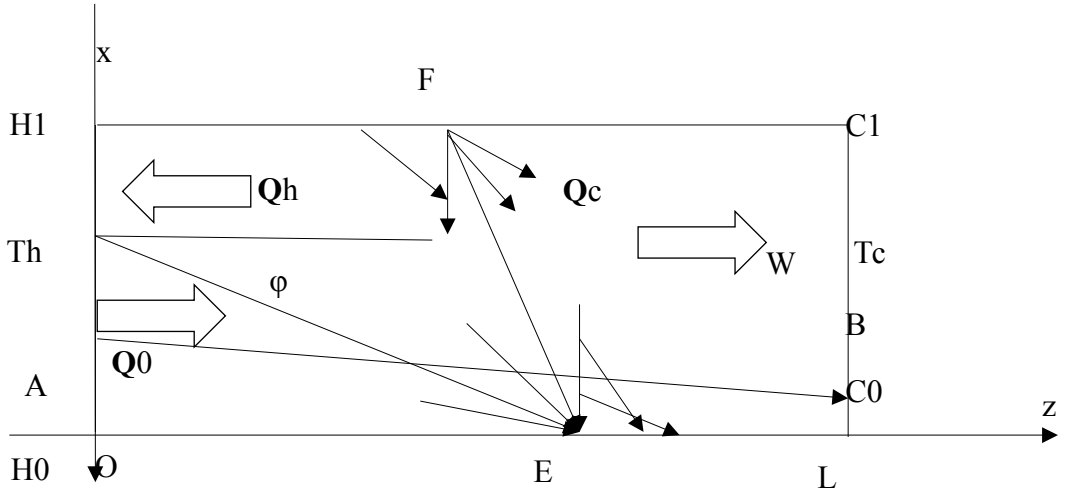


Рис. 2.1. Геометрія проблеми

Передбачається, що ці резервуари забезпечують постійну температуру на цих сторонах, і теплові контакти інтерфейсу є ідеальними. В цьому випадку тепловий потік, що випромінюється цими стінками, буде визначатися за законом випромінювання абсолютно чорного тіла [9].

$$Q_{BBR}(T)=\int \hbar\omega n(T)(v_{gr}e)d\Gamma=\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(\phi)d\phi\int_0^{\infty}\frac{kdk}{(2\pi)^2}\hbar\omega n(T)v_{gr} \tag{2.6}$$

де e - нормаль до поверхні, що випромінює.

Тут зручно ввести поняття ефективної швидкості фононів

$$V_{eff}=\int \hbar\omega v_{gr}(\omega)n(T)d\Gamma/\int \hbar\omega n(T)d\Gamma \tag{2.7}$$

який можна використовувати для того, щоб переписати вираз для усередненої густини теплового потоку від стіни в такий спосіб:

$$Q_{BBR}=\frac{1}{\pi}V_{eff}E \tag{2.8}$$

Тепер розглянемо різні випадки розсіювання фононів на бічних сторонах зразка.

2.2. Абсолютно поглинаюча границя

Щоб ввести основні терміни, розглянемо граничний випадок, коли бічні кордону зразка абсолютно поглинають. В цьому випадку результуючий тепловий потік буде визначатися тільки фононами, які випускаються на гарячій стінці, падають на холодну і, навпаки (без відображень від бічних стінок). Тоді результуюча щільність теплового потоку визначається тільки різницею

$$Q_0=Q(H_0H_1\to C_0C_1)-Q(C_0C_1\to H_0H_1)=Q_{BBR}(T_h)\cdot R_0-Q_{BBR}(T_c)\cdot R_0 \tag{2.9}$$

Значення форм-фактора R_0 частини енергії, випромінюваної однієї зі сторін, яка йде безпосередньо на іншу сторону, без відображень в бічних стінках (див., Наприклад, лінію AB на рис. 2.1). Це визначається ізотропної природою випромінювання (2.6) і геометричними розмірами (і формою) зразка:

$$R_0=\frac{\int_0^W \frac{dx}{W} 2\int_0^{\arcsin(x/L)}\cos(\phi)\,d\phi}{2\int_0^{\pi/2}\cos(\phi)\,d\phi}=\frac{\sqrt{W^2+L^2}-L}{W}=\frac{W}{\sqrt{W^2+L^2}+L} \tag{2.10}$$

Зі співвідношення (2.9) для малих перепадів температур отримуємо вираз

$$Q_0\approx\frac{1}{\pi}V_{eff}\frac{dE}{dT}(T_h-T_c)R_0=\frac{1}{\pi}V_{eff}C_S(T_h-T_c)R_0 \tag{2.11}$$

Тепер ми можемо ввестиефіцієнт теплопровідності, як коефіцієнт пропорційності між щільністю теплового потоку і відношенням різниці температур до довжини зразка:

$$Q_0 = \kappa_{eff} \frac{(T_h - T_c)}{L} \tag{2.12}$$

Коефіцієнт теплопровідності виявляється представленим в звичайному для фононних систем вигляді:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_0 \tag{2.13}$$

Цей вислів містить інформацію про розміри провідника (два в знаменнику), теплоємності фононного газу, ефективної швидкості і ефективної довжині шляху фононів

$$\Lambda_0 = \frac{2}{\pi} LR_0 = \frac{2}{\pi} \frac{LW}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} \tag{2.14}$$

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

$$Q_0 = C_S V_{eff} \frac{1}{\pi} (T_h - T_c) \tag{2.15}$$

В даному випадку цей результат визначається відсутністю впливу бічних кордонів через відсутність фононної взаємодії з цими межами.

Однак в протилежному випадку абсолютно дзеркального відображення [8] фононів з бічними стінками наявність цих бічних стінок також не впливає на кінцевий результат [7], і величина потоку не залежить від довжини провідник. Ці граничні випадки мають ще одну спільну властивість. Це відсутність градієнта температури всередині зразка [10], тобто залежність температури від координати всередині зразка повинна бути представлена наступним чином:

$$T(z) = \frac{T_h + T_c}{2} \tag{2.16}$$

Такий вираз для температури можна пояснити хоча б з симетрії завдання. Однак виникає питання про визначення температури всередині зразка при відсутності термодинамічної рівноваги в фононної системі. В якості можливого визначення температури в цих ситуаціях варто ввести концепцію термометра, який вимірює щільність теплового потоку. У цьому випадку температура визначається як температура абсолютно чорного тіла з такою ж щільністю потоку.

У разі малих W і (або) великих L результуючий тепловий потік визначається шириною зразка, а довжина вільного пробігу фононів визначається співвідношенням, аналогічним відповідному висловом для тривимірного тепла. провідники в цій межі:

$$\Lambda_0(W \to 0) = \frac{1}{\pi} W \tag{2.17}$$

Тут необхідно обговорити два моменти. Перше відноситься до того факту, що, з одного боку, фізичний зміст виразу (2.16) визначається невеликим кутом, під яким, наприклад, холодна сторона видно з точок теплою боку, а не реальне зменшення середнього вільного пробігу кожного фонона. З іншого боку, величина (2.16) може бути інтерпретована як середня довжина вільного пробігу, усереднена по всіх фононам, і оскільки лише мала частина з них досягає протилежного боку, довжина вільного пробігу виявляється такою малою.

У цьому граничному випадку слід зазначити наявність температурного градієнта, при якому (12) можна переписати в диференціальної формі, яка діє в кожній точці зразка.

$$Q_0(z) = -\kappa \nabla T(z) \tag{2.18}$$

Цей вираз відповідає звичайній градиентной формі для теплового потоку. Тут виникає основна проблема такого підходу. Тепловий потік (2.18) виявляється функцією координати з тієї причини, що бічні стіни не теплоізольовані, а підтримуються при постійній температурі. З цієї причини

різниця теплових потоків на кінцях зразка представлена в (2.9) як необхідний тепловий потік, але не постійний тепловий потік по всій довжині зразка. Таким чином, в цьому завданні ми фактично вивчаємо теплопровідність зразка, а властивості всієї системи в цілому, які в значній мірі визначаються тепловим контактом на бічних межах зразка.

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

Під час експериментів такої теплової контакт можливий через поверхню підкладки, на яку наноситься зразок. У разі теоретичного розгляду необхідно ретельно розглянути формулювання граничних умов. Зокрема, потрібно обговорення. Це припущення про наявність лінійного градієнта температури на бічних межах, яке використовується в моделі Казимира [7]. У даній роботі ми додатково досліджуємо можливість формування стаціонарного нерівноважного постійного теплового потоку за рахунок тільки особливостей взаємодії фононів з кордонами.

2.3. Абсолютно дифузне пружне відбиття

Розглядається граничний випадок ізотропного дифузного розсіяння на кордоні. У цій межі передбачається, що відбите випромінювання є повністю ізотропним незалежно від кута падіння фонона. Тобто функція розподілу відбитих фононів має прямокутну форму.

У цьому випадку розподіл фононів по енергії не змінюється. Тобто відображення передбачається повністю пружним. Таким чином, взаємодія фонона з кордоном не виглядає як поглинання фонона наступним випромінюванням, а є пружним відображенням того ж фонона від досить шорсткою поверхні під рівномірно розподіленими кутами.

Таким чином, цей випадок відрізняється від моделі Казимира [7], в якій передбачається, що межа є абсолютно чорним тілом. У моделі [7] фонони не

тільки изотропно розподілені за напрямками, а й їх розподіл енергії відповідає рівноважному розподілу Планка.

2.4. Ітераційне рівняння для розподілу температури

Тепер для простоти припустимо лінійний режим T_h - T_c << T_c і введемо нормовану температуру

$$t(z)=\frac{T(z)-T_c}{T_h-T_c} \tag{2.19}$$

Оскільки $t(z=0)=1$ і $t(z=L)=0$ ми можемо розглянути однорідний ізотропний джерело фононів на кордоні H_0H_1, який випромінює енергію з щільністю потоку (2.8) $Q_{BBR}(T_h)=1/W$ і не має джерела тепла на правій (холодної) границі $Q_{BBR}(T_c)=0$.

У цьому випадку частина фононів, випромінюваних лівої (гарячої) стінкою, проходить через протилежну холодну стінку, створюючи тепловий потік

$$q_{c0}=R_0=\frac{1}{W}\left[\sqrt{W^2+L^2}-L\right] \tag{2.20}$$

Інша частина фононів падає на дві бічні стінки. Ті фонони, які потрапляють на бічні стінки без проміжних відображень, тобто для яких ця взаємодія з бічною стінкою є першим після випромінювання (точка E на рис. 2.1), створюють потік енергії на цій стіні з розподілом щільності

$$\tilde{g}_1(z,\phi)\,dz\,d\phi=\frac{\sin(\phi)}{2W}\Theta(\phi_m(z)-\phi)\,dz\,d\phi \tag{2.21}$$

Де Θ - ступенькова функція Хевісайда, φ - кут між імпульсом фонона і віссю зразка,

$$\sin(\phi_m(z))=\frac{W}{\sqrt{W^2+Z^2}} \tag{2.22}$$

максимальний кут падіння фононів в точці з координатою z.

Для абсолютно изотропного дифузного віддзеркалення щільність розподілу відбитих фононів буде визначатися співвідношенням

$$g_1(z,\phi)=g_1(z)\Theta(\pi-\phi)=\frac{1}{2W}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]\cdot\Theta(\pi-\phi) \tag{2.23}$$

Частина цієї енергії буде надходити назад у нагрівач, створюючи тепловий потік

$$q_{h1}=\int_0^L dz\,\frac{1}{2}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]g_1(z) \tag{2.24}$$

Інша частина створить потік тепла через праву (холодну) стіну

$$q_{c1}=\int_0^L dz\,\frac{1}{2}\left[1-\frac{L-z}{\sqrt{W^2+(L-z)^2}}\right]g_1(z) \tag{2.25}$$

Решта фонони падають на протилежну бічну стінку і знову дифундують від неї (точка *F* на рис. 2.1). Розподіл теплового потоку після цього подальшого відображення знову изотропно і, в залежності від z, має вигляд

$$g_2(z)=\frac{1}{2}\int_0^L dz_1\,\frac{W^2}{\left[W^2+(z-z_1)^2\right]^{3/2}}\,g_1(z_1)\equiv Pg_1 \tag{2.26}$$

Загальний тепловий потік, що падає на бічну стінку через ці фононів, дорівнює

$$q_{s1}=\int_0^L dz\,\frac{1}{2}\left[\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}+\frac{L-z}{\sqrt{W^2+(L-z)^2}}\right]g_1(z)\equiv\int_0^L dz\,g_2(z) \tag{2.27}$$

Співвідношення (2.24), (2.25) і (2.27), очевидно, забезпечують збереження повної енергії

$$\int_0^L dz_1\,g_1(z_1)\equiv q_{h1}+q_{s1}+q_{c1} \tag{2.28}$$

У співвідношенні (26) для зручності ми ввели лінійний інтегральний оператор *P*. Ми можемо використовувати його для запису щільності розподілу теплового потоку від бічної межі, яка обумовлена тими фононами, які мають n дифузних відображень:

$$g_n(z)=P^n g_1(z) \tag{2.29}$$

Отже, тепловий потік від бічної межі, який враховує внесок всіх фононів, тобто тих, які мають одне, два і т. Д. Відображення, дорівнює

$$G(z)=g_1+Pg_1+P^2 g_1+\ldots=\sum_{n=0}^{n=\infty} P^n g_1 \tag{2.30}$$

Рівняння (2.30) являє итераційну форму для рівняння, яке описує розподіл температури уздовж зразка. При цьому кожна з ітерацій відноситься до певного числа віддзеркалень.

В результаті рішення рівняння. (2.30), ми бачимо, що для великого відношення $W/L > 1$ достатньо декількох ітерацій, щоб рішення сходилося. Наприклад, для випадку $W / L = 100$ виходить використання тільки однієї ітерації. Таким чином, одного дифузного віддзеркалення досить для забезпечення стаціонарного розподілу температури. Цей розподіл виявляється майже рівномірним, а температура дорівнює середньому значенню температур нагрівача і охолоджувача (2.16). Для випадку $W / L = 10$ виходить дві ітерації, і розподіл температури відрізняється від постійного значення до 10%.

В протилежному граничному випадку дуже малого відносини W / L потрібно набагато більшу кількість ітерацій, щоб отримати сходяться рішення. Наприклад, коли $W / L = 0{,}1$, нам потрібно більш 70 ітерацій, а для $W / L = 0{,}01$ - більше 2400.

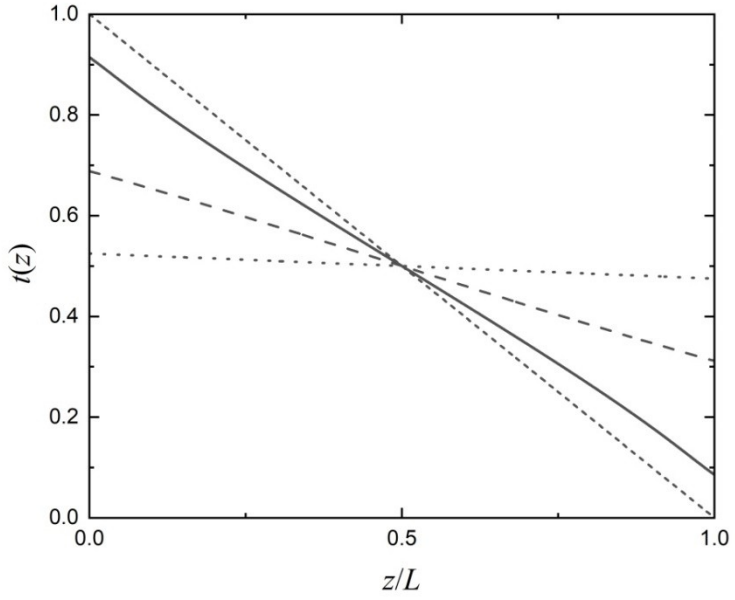


Рис.2.2 а. Рішення итеративного рівняння. (2.30) для різних співвідношень L і W для різного числа Nit ітерацій. Пунктирна лінія позначає W / L = 10, пунктирна лінія - W / L = 1, суцільна лінія - W / L = 0,1. Коротка пунктирна лінія показує лінійну залежність.

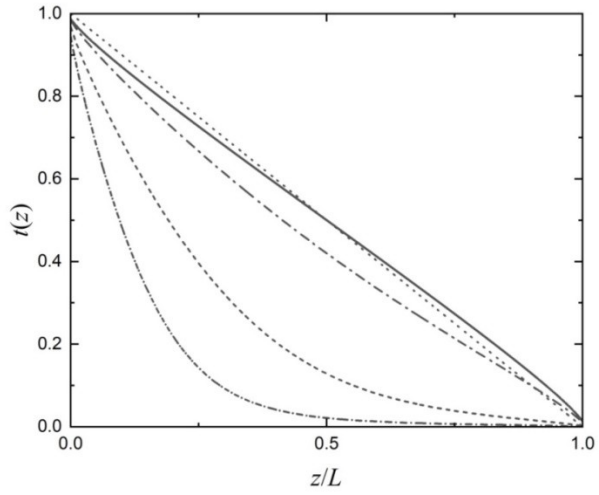


Рис.2.2 б. Рішення итеративного рівняння. (2.30) для відносини $W / L = 0{,}01$ для різного числа N_{it} ітерацій. Пунктирна лінія $N_{it} = 100$, коротка пунктирна лінія $N_{it} = 300$, довга пунктирна лінія $N_{it} = 1200$, суцільна лінія позначає

остаточне рішення з N_{it} = 2400. Коротка пунктирна лінія показує лінійну залежність.

На рис. 2.2 показані приклади рішень $G(z)$ для різних співвідношень L і W, а також послідовних ітерацій, що забезпечують сходяться рішення. Ми бачимо, що при чисто диффузионном або квазібаллістіческом розсіянні ми ніколи не отримували абсолютно лінійної залежності [10,11].

2.5. Інтегральне рівняння для розподілу температури

Рівняння (2.30) можна використовувати для отримання інтегрального рівняння, рішенням якого є функція G (z):

$$G(z)=g_1+Pg_1+P^2 g_1+\ldots=g_1+P(g_1+Pg_1+\ldots)=g_1+PG \tag{2.31}$$

Отже, використовуючи формулу (2.23) ми отримуємо

$$G(z)=\frac{1}{2W}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]+\frac{1}{2}\int_0^L dz_1 \frac{W^2}{\left[W^2+(z-z_1)^2\right]^{3/2}} G(z_1) \tag{2.32}$$

Очевидно, що це інтегральне рівняння може бути отримано і іншими фізичними аргументами. Для цього можна просто ввести шукану невідому функцію G (z) і зажадати рівності потоків енергії в кожній точці бічної межі.

Співвідношення (2.32) зручно, якщо ми хочемо отримати наближені аналітичні рішення, розглянути граничні випадки і розглянути баланс теплових потоків в зразку. Для подальшого обговорення це більш зручно з рівняння. (2.32) для теплового потоку, щоб отримати рівняння для нормованої температури (2.19) шляхом множення рівняння. (2.32) до W:

$$t(z)=\frac{1}{2}\left[1-\frac{z}{\sqrt{W^2+z^2}}\right]+\frac{1}{2}\int_0^L dz_1 \frac{W^2}{\left[W^2+(z-z_1)^2\right]^{3/2}} t(z_1) \tag{2.33}$$

Тут ми використовуємо наступне визначення для ефективної температури (2.19) бічної стінки t (z) = W G (z), яке описано після рівняння. (2.16).

З рівняння з (2.33) випливає, що для дуже короткого зразка, коли $W << L$, температура t (z) = 1/2, що відповідає результату (2.16).

Для будь-якого відношення між W і L ми можемо отримати значення t в середині вибірки:

$$t\left(z=L/2\right)=\frac{1}{2} \tag{2.34}$$

Цей результат може бути отриманий із загального властивості симетрії рівняння. (2.33): симетрія T (z) щодо центру зразка:

$$t\left(z\right)=t\left(L-z\right) \tag{2.35}$$

Нарешті, можна показати, що в граничному випадку вузької вибірки рівняння. (2.33) дає відому лінійну залежність для температури:

$$t\left(z\right)=1-\frac{z}{L} \tag{2.36}$$

Рис. 2. 3 показує різницю між реальним вирішенням рівняння. (2.33) знайдено за допомогою ітераційної процедури і наближеною лінійної залежності (2.38). Малюнок демонструє достатню зменшення різниці зі зменшенням співвідношення W / L.

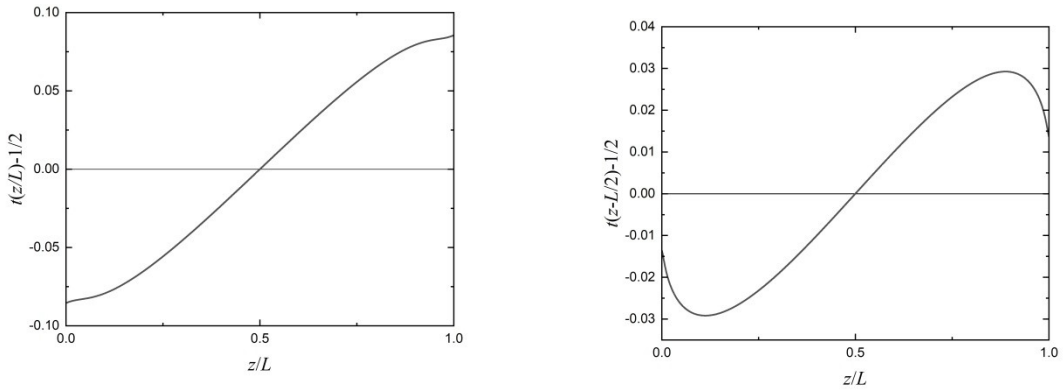


Рис. 2.3. Різниця точного ітеративного і наближеного лінійного рішення (2.36)

На рис. 2.3 показана ще одна суттєва особливість отриманого рішення - нестрогая лінійність розподілу температури навіть при дуже великих L. В результаті цього ефекту градієнт температури в центрі провідника відрізняється від ставлення температури Різниця між нагрівачем і охолоджувачем на відстані між ними:

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

(2.37)

З цієї причини розташування термометрів важливо для правильного визначення коефіцієнта теплопровідності. Рис.2.3. показана залежність відносини r_T від відносини L / W.

Якщо для випадку дуже коротких і широких зразків цей ефект очевидний (див. рівняння (2.16)), то для довгих провідників цей результат досить незвичайний. Таким чином, для випадку $L / W = 10$ похибка визначення коефіцієнта теплопровідності, викликана неправильним урахуванням розташування термометрів, може досягати 23%.

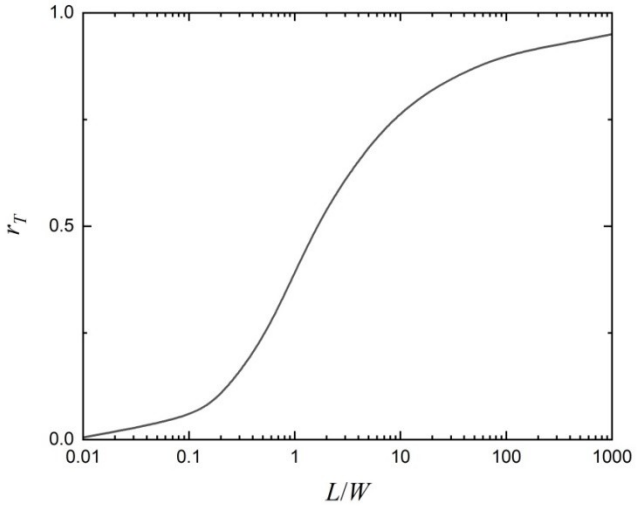


Рис. 2.4. Відношення градієнта температури в центрі провідника до різниці температур між нагрівачем і охолоджувачем, поділене на довжину провідника як функцію розміру зразка

2.6. Висновок

У розділі розглядається проблема формування стаціонарного теплового потоку і стаціонарного нерівноважного розподілу температури в системі невзаимодействующих фононів двовимірних зразків довільних розмірів.

В якості закону відображення фононів від країв зразка запропоновані пружні ізотропні дифузні відображення (2.21), в яких фонон відбивається без зміни енергії, але в довільному напрямку, незалежно від напрямку падіння дерева. Отримано і вирішено інтегральне рівняння (2.32), яке описує стаціонарний розподіл температури. Знайдене розподіл в загальному випадку відрізняється від лінійного (Рис. 2.2, 2.3).

Нелінійна температурна залежність призводить до того, що градієнт температури всередині провідника не збігається з відношенням різниці температур між нагрівачем і охолоджувачем до відстані між ними. З цієї причини при визначенні коефіцієнта теплопровідності необхідно правильно враховувати розташування термометра в зразку (Рис. 2.4).

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ КОЕФІЦІЄНТА ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

3.1. Баланс теплового потоку

Знайдене рішення для функції $G(z)$ дозволяє враховувати баланс теплового потоку і розподіл температури всередині зразка. Загальний внесок всіх фононів в зворотний потік через гарячу стінку q_h і прямий потік через холодну стінку qc визначається співвідношеннями, подібними (2.24) і (2.25)

$$q_h = \int_0^L dz \frac{1}{2}\left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}}\right] G(z) \tag{3.1}$$

$$q_c = q_{c0} + \int_0^L dz \frac{1}{2}\left[1 - \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right] G(z) \tag{3.2}$$

Крім того, рівняння (2.32) співвідношення дозволяє перевірити закон збереження енергії

$$q_h + q_c = 1 \tag{3.3}$$

Для цього достатньо розрахувати інтеграл виразу (2.32) по всій довжині зразка, тобто визначити повну енергію, що падає (і відтворену) на бічні стінки

$$\int_0^L G(z)\,dz = \int_0^L g_1(z)\,dz + \frac{1}{2}\int_0^L dz \int_0^L dz_1 \frac{W^2}{\left[W^2 + (z - z_1)^2\right]^{3/2}} G(z_1) \tag{3.4}$$

Розрахунок в г.ч.с. інтеграли по z ми отримуємо

$$\int_0^L G(z)\,dz = 1 - q_{c0} + \frac{1}{2}\int_0^L dz G(z)\left(\frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} + \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}}\right) \tag{3.5}$$

Нарешті, використовуючи рівняння. (3.1) і (3.2) отримуємо шуканий закон збереження (3.3). Використовуючи формулу (2.32) можна визначити явно вираз для теплового потоку уздовж зразка

$$q(z)=q_r(z)-q_l(z) \tag{3.6}$$

Тут

$$q_r(z)=\frac{1}{W}\left(\sqrt{W^2+z^2}-z\right)+\int_0^z dz_1\frac{1}{2}\left[1-\frac{z-z_1}{\sqrt{W^2+(z-z_1)^2}}\right]G(z_1) \tag{3.7}$$

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

$$q_l(z)=\int_z^L dz_1\frac{1}{2}\left[1-\frac{z_1-z}{\sqrt{W^2+(z_1-z)^2}}\right]G(z_1) \tag{3.8}$$

- тепловий потік, направлений вліво через фононів, відбитих від бічних стінок від точок з координатою z_1 більшою, ніж z.

В цьому випадку очевидні співвідношення виконуються на кінцях вибірки:

$$q_r(0)=1 \tag{3.9}$$

тобто порівняно з початковим потоку;

$$q_r(L)=\frac{1}{W}\left(\sqrt{W^2+L^2}-L\right)+\int_0^L dz_1\frac{1}{2}\left[1-\frac{L-z_1}{\sqrt{W^2+(L-z_1)^2}}\right]G(z_1)=q_c \tag{3.10}$$

$$q_l(0)=\int_0^L dz_1\frac{1}{2}\left[1-\frac{z_1}{\sqrt{W^2+z_1{}^2}}\right]G(z_1)=q_h \tag{3.11}$$

З цих співвідношень слід рівність теплових потоків на кінцях зразка

$$q(z=0)=q_r(0)-q_l(0)\equiv 1-q_h \quad \text{і} \quad q(z=L)=q_r(L)-q_l(L)\equiv q_c \tag{3.12}$$

Так

$$q(z=L)=q(z=0)\equiv q \tag{3.13}$$

Крім того, співвідношення (2.32) дозволяє перевірити, що тепловий потік не залежить від координати z. Для цього достатньо диференціювати співвідношення (3.7) і знову використовувати інтегральне рівняння (2.32), щоб переконатися, що ця похідна дорівнює нулю. Отже, ми отримуємо, що

$$q(z)=q_r(z)-q_l(z)=q=const \tag{3.14}$$

Постійний тепловий потік уздовж зразка зумовлений теплоізоляційним характером взаємодії фононів з бічними межами.

3.2. Коефіцієнт ефективної теплопровідності

Перейдемо до розгляду коефіцієнта теплопровідності. Найбільш очевидним визначенням цього коефіцієнта є інтегральне визначення коефіцієнта, аналогічне співвідношенню (2.12)

$$Q_0=\kappa_i\frac{(T_h-T_c)}{L} \tag{3.15}$$

Це визначення обґрунтовується постановкою самого завдання, в якій задаються температури нагрівача і охолоджувача і досліджується результуючий тепловий потік. Використовуючи безрозмірну температуру (2.19), отримуємо для теплового потоку (3.15)

$$Q_0=\frac{q}{W}=\frac{\kappa_i}{L} \tag{3.16}$$

Тут ми вводимо безрозмірний коефіцієнт теплопровідності кі, який можна визначити з коефіцієнта ефективної теплопровідності (13) за висловом

$$\kappa_{eff} == \frac{1}{\pi} C_S V_{eff} W \kappa_i \tag{3.17}$$

Для загального випадку з виразу (42) дозволяє знайти явне вираження для коефіцієнта теплопровідності:

$$\kappa_i = \frac{L}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} + \frac{L}{W^2} \int_0^L dz \left[1 - \frac{L - z}{\sqrt{W^2 + (L - z)^2}} \right] t(z) \tag{3.18}$$

Перший доданок в (55) описує внесок фононів, які безпосередньо потрапляють з нагрівача в охолоджувач (траєкторія AB на рис. 3.1). При зменшенні поперечного розміру W провідника цей член прагне до постійного значення, яке при обраної нами нормировке дорівнює половині (див. Рис. 3.6) і відповідає результату (3.11) - (3.14).

Другий доданок визначається внеском фононів, які мають множинні відображення від бічних стінок. Якщо функція *t*(*z*) лінійна (2.36), цей член відповідає межі Казимира, а (3.18) дає вираз

$$\kappa_i = \frac{1}{2} \frac{L}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{W^2 + L^2} + L}{W} \right) \tag{3.19}$$

Але якщо ми знайдемо коефіцієнт теплопровідності з точного рішення *t* (z) і спробуємо апроксимувати залежність цього коефіцієнта від відносини W / L аналітичним виразом ка, то воно матиме вигляд

$$\kappa_a = \ln \left(\frac{\sqrt{W^2 + L^2} + L}{W} \right) - \frac{L}{\sqrt{W^2 + L^2} + L} \tag{3.20}$$

Ця досить сильна різниця (до двух раз) з'являється, незважаючи на дуже хороший збіг між дійсною функцією *t* (*z*) і її лінійним наближенням (2.36) виключно для дуже малих *W* / *L* (див. Рис 3.1, 3.2). Справа в тому, що ці функції відрізняються тільки в околиці решт, і інтеграл в (3.18), який визначає тепловий потік, включає в себе різницю між одиницею і виразом, яка відрізняється від одиниці поблизу цих точок. В результаті ми отримуємо

практично однаковий градієнт температури, але різні значення як теплового потоку, так і коефіцієнта теплопровідності.

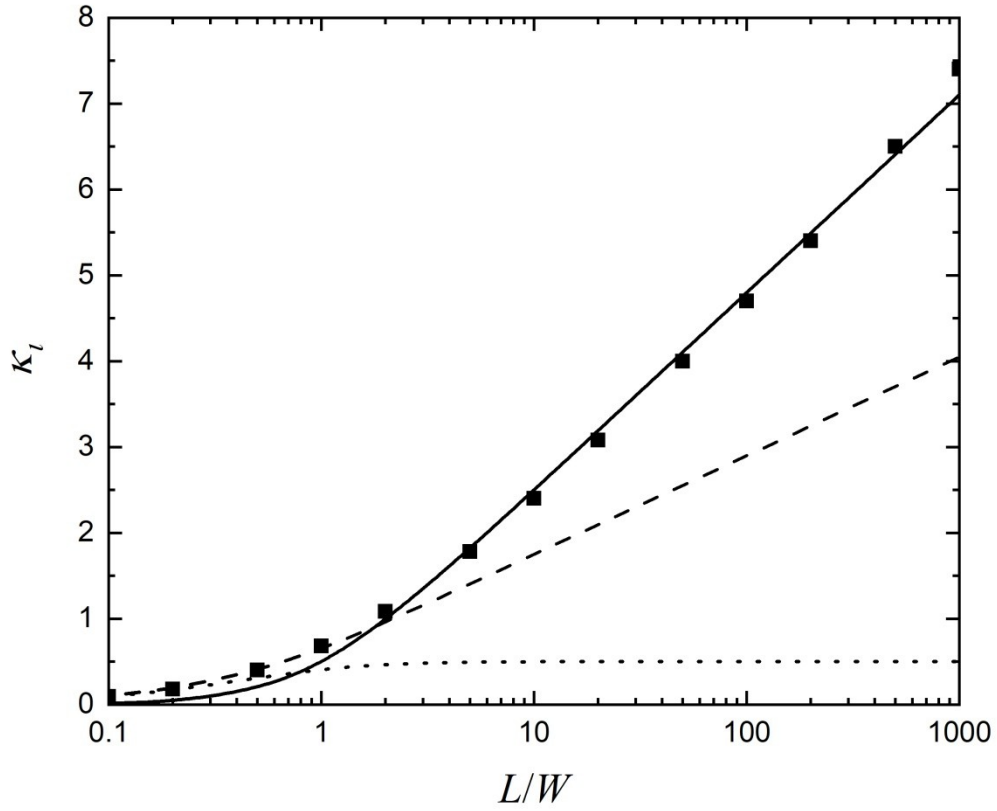


Рис. 3.1. Залежність коефіцієнта теплопровідності від співвідношення L/W в різних моделях. Точками показано рішення рівняння (3.32), суцільною лінією представлено аналітичне наближення (3.20), пунктирною лінією позначений межа Казимира (3.19), пунктирною лінією показаний випадок абсолютно поглинаючих кордонів (2.13).

На рис. 3.1 наведено порівняння залежностей коефіцієнта теплопровідності для різних моделей: ітераційне рішення рівняння. (2.32), її аналітичне наближення (3.20), модель Казимира з лінійним градієнтом (3.19) і граничний випадок абсолютно дзеркального відображення.

Ще одна відмінність результатів розглянутого підходу і моделі Казимира з'являється, якщо ми розглянемо ефективну довжину вільного пробігу фонона будь-якої природи: або Λ_R, що забезпечується будь-якими процесами питомої

опору, або з Λ_N, забезпечуваним будь-якими внутрішніми процесами фононної системи.

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

У нашому підході фонони випромінюються нагрівачем і потім мають множинні пружні ізотропні відображення на бічних стінках, поки не буде досягнутий стаціонарний розподіл температури. Кількість цих відображень N_{refl} можна визначити з ітераційного рівняння (2.32) як кількість ітерацій, необхідне для збіжності рішення.

Це число зростає зі зменшенням товщини зразка W набагато швидше (див. Рис. 3.2), ніж ставлення L/W, і тому довжина вільного пробігу фононів $\Lambda_{R,N}$ повинна порівнюватися з дуже великою довжиною близько

$$\Lambda_{eff} > N_{refl} \cdot W \tag{3.21}$$

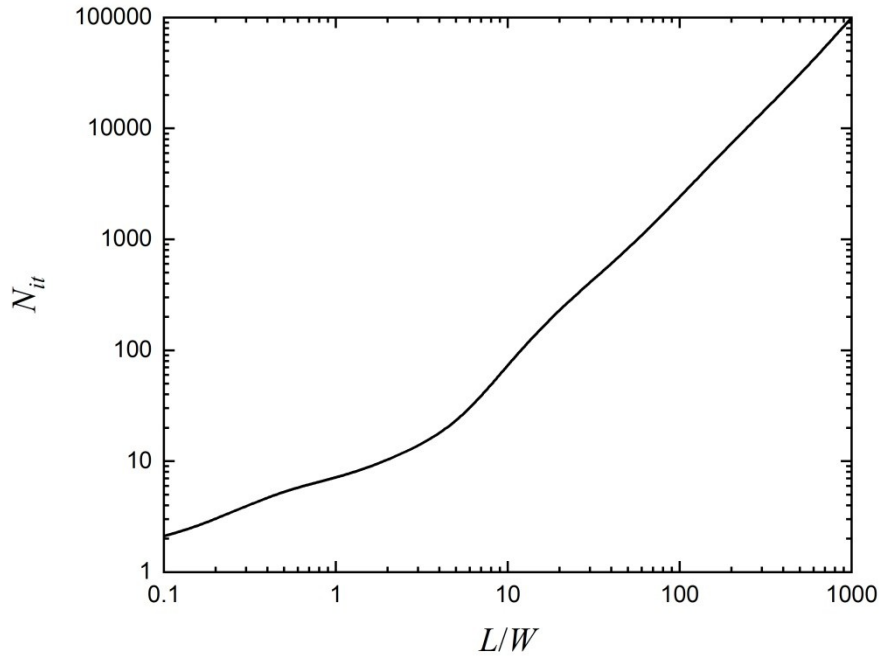


Рис. 3.2. Зростання числа ітерацій в залежності від L/W.

Отже, не виключено, коли

$$W << L << \Lambda_{R.N} << \Lambda_{eff} \tag{3.22}$$

тобто довжина вільного пробігу фононів набагато більше, ніж розмір зразка, але вона набагато менше відстаней, на які повинен переміщатися фонон, відбиваючись від бічних сторін, аж до формування лінійної залежності, необхідної для застосування модель Казимира. У такій ситуації залежність коефіцієнта теплопровідності від розмірів може сильно відрізнятися від логарифмічною розбіжність, характерною для моделі Казимира, і навіть зменшуватися зі збільшенням довжини зразка.

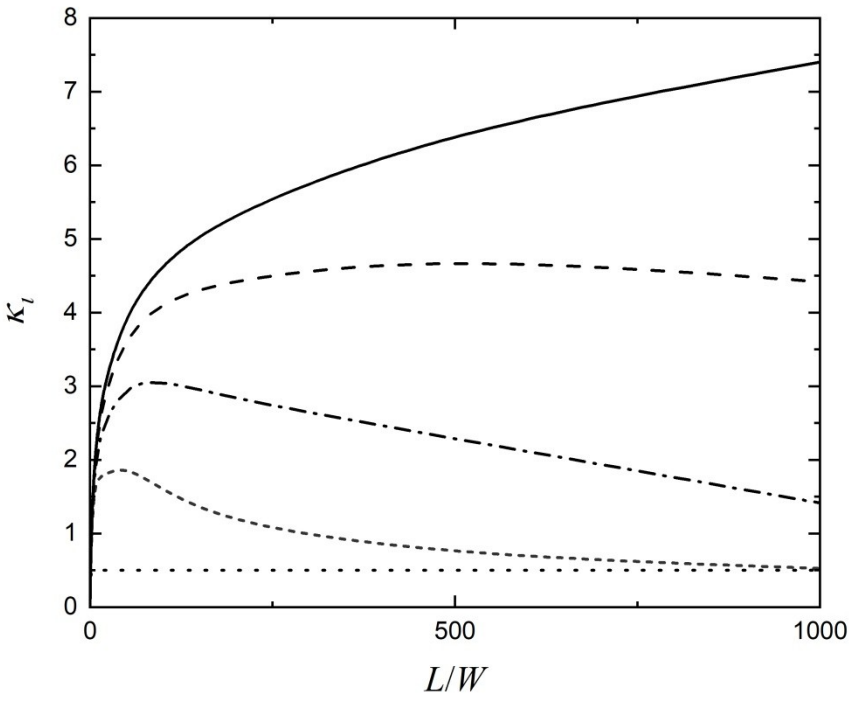


Рис.3.3. Залежність коефіцієнта теплопровідності від відносини L / W для різного значення ефективного середнього вільного пробігу фононів: а) $\Lambda_{R,\,N} / L = 250$ (пунктирна лінія), б) $\Lambda_{R,\,N} / L = 70$ (штрих-пунктир) лінія), в) $\Lambda_{R,\,N} / L = 25$ (коротка пунктирна лінія). Суцільна лінія відноситься до випадку нескінченної $\Lambda_{R,\,N}$ і є рішенням рівняння. (2.32). Пунктирною лінією показаний випадок абсолютно поглинаючих границь (2.13).

3.3. Коефіцієнт температурного кондактанса у тривимірному випадку

Коефіцієнтом температурного кондактанса називають відношення повного потоку тепла до різниці температур:

$$K=\frac{Q}{\left(T_h-T_c\right)} \tag{3.22}$$

Розглянемо кокретні випадки, що реалізуються в експерименті в моделях різної розмірності. Для того, щоб здобути співвідношення між повним потоком тепла Q і різницею температур $T_\mathrm{h} - T_\mathrm{c}$ та густиною потока тепла $q=\kappa\nabla T$ ми множимо це співвідношення на площу зразка *A:*

$$Q=Aq=A\kappa_{3D}\nabla T=\kappa_{3D}\left(T_h-T_c\right)\frac{A}{L}\equiv K\left(T_h-T_c\right) \tag{3.23}$$

Таким чином для коефіці.нте температурного кондактанса здобуваєто такой зв'язок з коефіцієнтом теплопровідності.,

$$K=\kappa_{3D}\frac{A}{L} \quad . \tag{3.24}$$

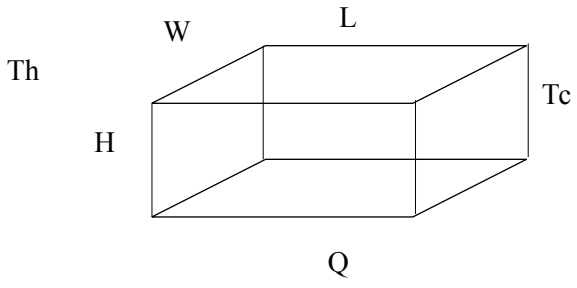


Рис.3.4. До визначення температурного кондактанса в тривимірному випадку

Для коефіцієнта теплопровідності беремо формулу Казимира (1.1)

$$\kappa_{3D}=\frac{1}{3}C_V V_{eff}\Lambda_{Casimir} \tag{3.25}$$

Тобто для кондактанса маємо

$$K=\kappa_{3D}\frac{A}{L}=\frac{1}{3}C_V V_{eff}\,\Lambda_{Casimir}\frac{A}{L} \tag{3.26}$$

Для умов експерименту [16], де досліджувалась теплопровідність кремнію, знайдемо таке співвідношення для температурної залежності кондактанса:

$$K=\kappa_{3D}\frac{A}{L}=\frac{1}{3}C_V V_{eff}\,\Lambda_{Casimir}\frac{A}{L}=834\,T^3\,\Lambda_{Casimir}(W,H,L)\frac{WH}{L} \tag{3.27}$$

В роботі [11] автори нормували кондактанс на универсальную постоянную с размерностью кондактанса

$$K_0=\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h}\approx 10^{-12}T \tag{3.28}$$

.

Для таким чином нормованного кондактанса здобуваємо:

$$K/4K_0=2.2\cdot 10^{14}T^2\,\Lambda_{Casimir}(W,H,L)\frac{WH}{L} \tag{3.29}$$

Тепер для простоти нормуємо на W:

$$K/4K_0=2.2\cdot 10^{14}T^2\frac{W^2H}{L}\frac{\Lambda_{Casimir}(W,H,L)}{W} \tag{3.30}$$

Для експериментального зразка W=200 nm, L = 5000 nm

$$K/4K_0=0.176\,T^2\frac{\Lambda_{Casimir}(W,H,L)}{W} \tag{3.31}$$

Тепер для ефективної довжини пробігу фононів візьмемо явний вираз Казимира

$$\Lambda_{Casimir}(W,H,L)=1.12\sqrt{WH} \tag{3.32}$$

І, остаточно, маємо

$$K/4K_0=0.176\,T^2\frac{\Lambda_{Casimir}(W,H,L)}{W}=0.139\,T^2 \tag{3.33}$$

3.4. Коефіцієнт теплопровідності у двовимірному випадку

Розрахуємо кондактанс для умов цього ж експерименту в моделі двовимірного зразка. Для того, щоб здобути співвідношення між повним потоком тепла Q і різницею температур $T_h - T_c$ та густиною потока тепла $q=\kappa\nabla T$ ми множимо це співвідношення на ширину зразка W:

$$Q=Wq=W\kappa_{2D}\nabla T=\kappa_{2D}\left(T_h-T_c\right)\frac{W}{L}\equiv K\left(T_h-T_c\right) \tag{3.34}$$

Таким чином для коефіці.нте температурного кондактанса здобуваєто такой зв'язок з коефіцієнтом теплопровідності.,

$$K=\kappa_{2D}\frac{W}{L} \quad . \tag{3.35}$$

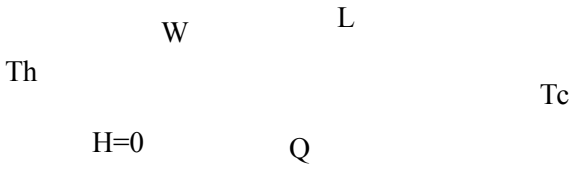


Рис.3.5. До визначення температурного кондактанса в двовимірному випадку

Для коефіцієнта теплопровідності беремо співвідношення, що зобути в цій дипломній робті:

$$\kappa_{2D}=\frac{1}{2}C_S V_{eff}\Lambda_{OurTheory}=5.8\cdot10^{-5}T^2\Lambda_{OurTheory} \tag{3.36}$$

Тоді для кондактанса маємо

$$K=\kappa_{2D}\frac{W}{L}=\frac{1}{2}C_S V_{eff}\Lambda_{OurTheory}\frac{W}{L} \tag{3.37}$$

Тепер можна визначити залежність від розмірів та температури

$$K=\kappa_{2D}\frac{W}{L}=\frac{1}{2}C_S V_{eff}\Lambda_{OurTheory}\frac{W}{L}=5.8\cdot10^{-5}T^2\Lambda_{OurTheory}(W,L)\frac{W}{L} \quad (3.38)$$

Для нормованого кондактанса маємо

$$K/4K_0=1.5\cdot10^{7}T^{1}\Lambda_{OurTheory}(W,L)\frac{W}{L} \quad (3.39)$$

Для експериментального зразка W=200 nm, L = 5000 nm

$$K/4K_0=0.267T \quad (3.40)$$

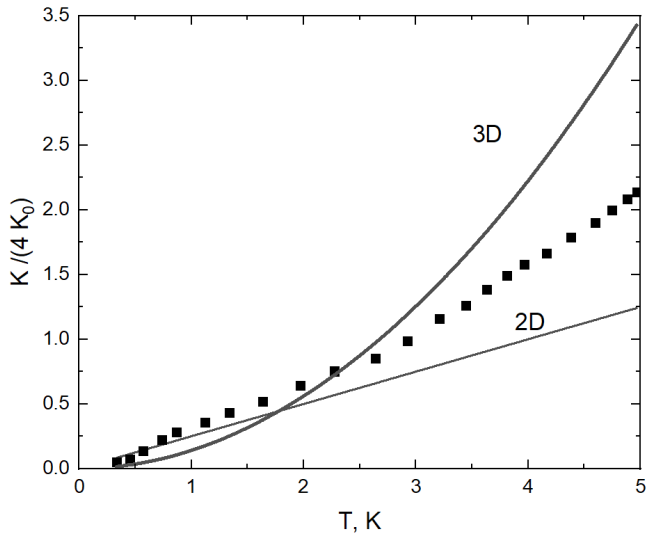


Рис.3.6. До визначення температурного кондактанса в двовимірному випадку

На Рис.3.6 приведено порівняння теоретичних розрахунків с результатами експериментів [16]. З Рис. 3.6. видно, що для температур нижчими за 2 К, коли зразок можно вважати двовимірним, спостерігається добре відповідність теорії та експерименту.

ВИСНОВКИ

В дипломі проаналізувано сучасний стан теорії теплопровідності наноматеріалів, розглянуто існуючи теоретичні моделі, їх властивості та обмеження. Досліджені фізичні механізми, що забезпечують стаціонарний тепловий потік та стаціонарний нерівноважний розподіл температури у фононній системі без взаємодії між фононами.

Розроблено нову модель абсолютно дифузного еластичного відбиття фононів; та в рамках цієї моделі розрахувано коефіцієнт теплопровідності.

В роботі запропоновано використання методу зображень для обчислення коефіцієнта теплопровідності двовимірних наноструктур, що звело задачу до моделювання процесів дифузії на дискретних періодичних потенціалах.

Отримано інтегральне рівняння, яке дає опис всіх можливих граничних співвідношень між довжиною і шириною провідника.

Знайдено чисельний розв'язок цього рівняння методом ітерацій.

У граничних випадках отримані аналітичні розв’язки, які дозволили знайти інтерполяційні співвідношення, що можуть застосовуватися в проміжних режимах

Проведено порівняння з існуючими моделями та експериментальними даними.

Запропонована методика дозволила розробити алгоритми для подальшого дослідження інших типів взаємодії фононів з границями провідника.

1. A. Balandin, Nat. Mater. 10, 569 (2011).
2. A.Tavakoli, Ch. Blanc, H. Ftouni, K.J. Lulla, A. D. Fefferman, E. Collin, and O. Bourgeois, Phys. Rev. B 95, 165411 (2017).
3. C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 5th ed. (Wiley, New York, 1976), p. 143
4. D. L. Nika, A. S. Askerov, A. A. Balandin Nano Lett. 12, 6, 3238 (2012).
5. D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier, Phys. Rev. B 72, 064305 (2005).
6. E. A. Jackson, A. D. Mistriotis, J.Phys.: Condens. Matter., 1,1223 (1989).
7. H. J. Maris, Sh. Tamura, Phys.Rev. B 85, 054304 (2012).
8. H.B.G. Casimir, Physica V, 6 (1938).
9. J. M. Ziman, Electrons and Phonons (Clarendon Press, Oxford, (2001).
10. J. M. Ziman, Electrons and Phonons, Ref. 9, pp. 460-465. '
11. M. Asheghia, K. Kurabayashi, R. Kasnavi, K. E. Goodson, J. of Appl. Phys., 91, 5079 (2002).
12. M. Perlmutter and R. Siegel, J. Heat Transfer 85C, 55 (1963).
13. N. Mingo, Phys. Rev. B 68, 113308 (2003).
14. O. Bourgeoisa, D. Tainoff, A. Tavakolia, Y. Liu, Ch.Blanc, M. Boukhari, A. Barski, E. Hadji, C. R. Physique 17 (2016) 1154–1160
15. R. Berman, F. E. Simon and J. M. Ziman, Proc. R. Soc. London, Ser. A 220, 171 (1953).
16. S. I. Tamura and T. Harada, Phys. Rev. B 32, 5245 (1985).
17. S. Mei, L. N. Maurer, Z. Aksamija, and I. Knezevic, J. Appl. Phys., 116, 2014 , 164307.
18. T. Klitsner, J. VanCleve, H. Fischer, and R. Pohl, Phys. Rev. B 38, 7576 (1988).
19. Tamura, J. A. Shields, and J. P. Wolfe, Phys. Rev. B 44, 3001 (1991).

20. There is experimental evidence that some inelastic scattering of phonons takes place at rough crystal surfaces. See L. J. Challis, S. V. J. Kenmuir, A. P. Heraud, and P. A. Russell, in Phonon Scattering in Condensed Matter V, Ref. 3, p. 180. However, this partial thermalization can be treated as diffuse scattering in the Monte Carlo simulations.