

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В.Н.КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО – НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ

Кафедра комп'ютерної фізики

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до кваліфікаційної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр
«Аналітичний ітеративний підхід для опису теплопровідності
нанострічок»

Виконав: студент 6 курсу, групи НФ-64

Спотар М.С.

спеціальність:

105 Прикладна фізика та наноматеріали

освітня програма:

Комп'ютерна фізика

Керівник: проф. Немченко К.Е.

Рецензент:

Харків – 2024

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 НЕМЧЕНКО

“ ”

2024 року

З А В Д А Н Н Я НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Спотару Микиті Сергійовичу

1. Тема роботи «Аналітичний ітеративний підхід для опису теплопровідності нанострічок» керівник роботи: Немченко Костянтин Едуардович, доктор фізико-математичних наук. Затверджено наказом по університету від 23 січня 2024 року № 4201/144.
2. Строк подання студентом роботи 22.05.2024
3. Перелік питань, які потрібно розробити:
 - 1) провести критичний аналіз літератури, та скласти огляд існуючих аналітичних методів розрахунку теплових потоків в нанострічках
 - 2) дослідити основні механізми формування спрямованого потоку фононої під дією градієнта температури ;
 - 3) розглянути нанострічку з довільним співвідношенням ширину до довжини;

- 4) розв'язати конкретну задачу про виведення аналітичної формули для профілю температури;
- 5) розглянути задачу про аналітичний ітераційний метод визначення теплових потоків в нанострічках довільної геометрії;
- 6) зробити висновки з ефективності певних методів розрахунку коефіцієнту теплопровідності нанострічок.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Ознайомлення з моделями опису теплопровідності в кристалах
2	Формування моделі теплопровідності кристала з шорсткою поверхнею
3	Виведення рівнянь, які описують тепловий профіль кристала з шорсткою поверхнею
4	Опис ітеративного методу розв'язання рівняння теплового профілю
5	Аналіз теплових параметрів моделі та формування висновків роботи
6	Подача науковому керівнику
7	Відгук, рецензія, підготовка до захисту
8	Попередній захист
9	Захист

5. Дата видачі завдання “ 23 ” лютого 2024 року.

Студент _____ Микита СПОТАР
 Керівник роботи _____ Костянтин НЕМЧЕНКО

РЕФЕРАТ

Микита Спотар. «Аналітичний ітеративний підхід для опису теплопровідності нанострічок» Кваліфікаційна робота магістра з прикладної фізики. – Х.: Харківський національний університет імені В. Н.Каразіна, 2024. — 60 с.

В роботі проведено дослідження теплових властивостей двовимірного кристала нанорозмірів. Зокрема, проведено аналіз літератури, та складено огляд чинних методів розрахунку теплових параметрів кристалічних тіл. У роботі також наведено аналіз фононної моделі розглядання процесів теплообміну всередині твердих тіл. Також проведене аналітичне дослідження фононного радіаційного теплообміну у двовимірних зразках та його залежності від взаємодії з крайовими границями при абсолютно ізотропному дифузному розсіюванні, та запропоновано загальний ітераційний метод для знаходження основних теплових характеристик даного тіла, таких як температурний профіль та коефіцієнт теплопровідності. Проведені розрахунки вищеперелічених теплових параметрів для нанострічки прямокутної геометрії та порівняння отриманих результатів з експериментальними вимірюваннями даних параметрів для графену. Результати даного порівняння свідчать про доречність використання наведеної у роботі моделі для опису фізики експерименту. Був запропоновано оригінальний метод розв'язування задачі аналітичного ітеративного підходу для опису теплопровідності нанострічок та аналізовано фізичну область його застосування. Результати роботи дозволяють зробити висновки про ефективність певних методів розрахунку теплових властивостей малих кристалів, а також запропонувати методологію проведення числових розрахунків та реальних експериментів, як для перевірки результатів роботи, та для подальшого застосування цих результатів на практиці.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДОГО ТІЛА, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ НАНОСТРІЧКИ, ДИФУЗІЙНЕ РОЗСІЮВАННЯ ФОНОНІВ, ІТЕРАЦІЙНИЙ МЕТОД

ABSTRACT

Mykyta Spotar. "Analytical iterative approach for thermal conductivity of nanoribbons description" Qualifying work of a master of applied physics. – Kh.: V.N.Karazin Kharkiv National University, 2024. – 60 p.

In the work, a study of the thermal properties of a two-dimensional crystal of nano-size was carried out. In particular, an analysis of the literature was carried out, and an overview of current methods for calculating the thermal parameters of crystalline bodies was compiled. The paper also provides an analysis of the phonon model of heat exchange processes inside solid bodies. An analytical study of phonon radiative heat transfer in two-dimensional samples and its dependence on the interaction with boundary boundaries during absolutely isotropic diffuse scattering was also carried out, and a general iterative method for finding the updated thermal characteristics of a given body, such as the temperature profile and thermal conductivity coefficient, was proposed. Calculations of the above-mentioned thermal parameters for nanoribbons of rectangular geometry were carried out and the results were compared with experimental measurements of these parameters for graphene. The results of this comparison indicate the appropriateness of using the model given in the article to describe the physics of the experiment. An original method of solving the problem of an analytical iterative approach for describing the thermal conductivity of nanoribbons was proposed and the physical area of its application was analyzed. The results of the work allow us to draw conclusions about the effectiveness of certain methods of calculating the thermal properties of small crystals, as well as to propose a methodology for conducting numerical calculations and real experiments, both for checking the results of the work and for further application of these results in practice.

KEYWORDS: SOLID BODY THERMAL CONDUCTIVITY, THERMAL CONDUCTIVITY OF A NANORIBBON, DIFFUSIVE SCATTERING OF PHONONS, ITERATIVE METHOD

Зміст

Вступ	8
1 Основні ідеї та рівняння	10
1.1 Кристалічна решітка	10
1.2 Коливання у твердому тілі	11
1.3 Щільність станів	14
1.4 Загальна теорія фононів	14
1.5 Рівняння руху фононів	17
1.6 Теплові властивості графену	19
1.7 Висновки розділу	20
2 Теоретична модель теплопроводності	21
2.1 Модель Казимира	21
2.2 Модель абсолютно дзеркального відбиття	23
2.3 Модель дифузійного розсіювання на поверхні	29
2.4 Висновки розділу	35
3 Теплопровідність двомірної нанострічки	37
3.1 Температурний профіль нанострічки	37
3.2 Тепловий потік	42
3.3 Висновки розділу	45
Висновки	46
Список використаних джерел	47

Вступ

Актуальність теми. Проблема опису теплообміну всередині наноструктур викликає все більший науковий інтерес із подальшим зменшенням масштабів технологій, що застосовують в електроніці, виробництві, медицині. Теоретичні дослідження процесів теплообміну у двовимірних діелектричних матеріалах часто зводяться до моделювання руху фононів уздовж зразка з урахуванням усіх факторів, які одночасно впливають на цей процес. Ці фактори включають природу відбиття фононів від країв зразка, наявність різних поляризацій фононів, особливості фононного спектра та результуючий спектральний енергетичний розподіл фононів. Крім того, якщо не обмежуватися балістичним режимом, то необхідно також враховувати взаємодію фононів між собою та з іншими квазічастинками або особливостями кристалічної решітки. Таке завдання виявляється надзвичайно громіздким, а виявлення найбільш значущих факторів, що визначають теплообмін всередині зразка, стає складним, а головне неоднозначним.

Основною метою - дослідження основних механізмів формування теплового потоку всередині твердого тіла. Зокрема, запропонувати ітераційний метод розрахунку теплових параметрів двовимірного кристала з домінуванням дифузійного розсіювання фононів на границях, аналізувати його фізичну область застосування та провести порівняння з експериментальними даними.

Об'єкт дослідження - теплові властивості двовимірних нанокристалів.

Предмет дослідження - процес теплообміну всередині нанострічок.

Методи дослідження – математичні методи теорії статистичної фізики, фізичної кінетики, фізики твердого тіла та термодинаміки.

Наукова новизна одержаних результатів - запропонована оригінальна методика розрахунку теплових характеристик двовимірних нанокристалів.

Практичне значення отриманих результатів - результати роботи дозволяють зробити висновки про ефективність певних методів розрахунку теплових характеристик твердих тіл малого масштабу запропонувати методологію проведення числових розрахунків та реальних експериментів,

як для перевірки результатів роботи, та для подальшого застосування цих результатів на практиці.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 50 сторінок, із них основного тексту 46 сторінок, 8 рисунків, список використаних джерел із 35 найменувань на 4 сторінки.

1 Основні ідеї та рівняння

1.1 Кристалічна решітка

Геометрична структура розташування атомів всередині твердого тіла фундаментальний параметр, який визначає його властивості. Для опису цієї геометричної структури використовується поняття кристалічної решітки - впорядкований набір положень або точок у просторі, які займають атоми, коли уся система знаходиться в основному стані [1]. Кристалічна решітка описує ідеалізовану структуру твердого тіла, для якої локальні умови для довільних точок твердого тіла, які знаходяться на тій же відстані, що і два вузли решітки, майже ніколи не відрізняються одна від одної, маючи на увазі можливість потрапити на границю твердого тіла чи дефект.

Для аналітичного представлення кристалічної решітки, її ділять на елементарні комірки - рівні геометрично тотожні багатогранники. Геометричне місце центрів елементарних комірок у кристалічній решітці задається рівнянням [2]

$$\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1)$$

де $\mathbf{r}_n$ - радіус вектор центру комірки, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ - базисні вектори решітки - довжини ребер елементарної комірки, n_1, n_2, n_3 - цілі числа, значення яких обмежені розмірами та формою твердого тіла. Обернена трійка векторів $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ та $\mathbf{b}_3$, задана як

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1} \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2} \end{aligned} \quad (1.2)$$

задає рівняння оберненої кристалічної решітки

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.3)$$

де $\mathbf{k}$ - радіус вектор центру елементарної комірки оберненої решітки, який

визначає можливі хвильові вектори коливань у даній решітці, k_1, k_2, k_3 - цілі числа.

1.2 Коливання у твердому тілі

Розглядаючи тверде тіло як сукупність атомів у кристалічній решітці, які коливаються навколо рівноважного стану, його функція Лагранжу [2; 3] приймає вигляд

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, s} m_s \dot{\mathbf{u}}_s^2(t, \mathbf{n}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}', s, s'} \Lambda_{j, j'}^{ss'}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_{sj}(\mathbf{n}) u_{s'j'}(\mathbf{n}') \quad (1.4)$$

де $\mathbf{n} = (n_1; n_2; n_3)$ вектор, який описує положення елементарної комірки, s - індекс атома у комірці, ν - кількість атомів у комірці, m_s - маса відповідного атома у комірці, j та j' - індекси трійки Декартових координат (x, y, z) , $\Lambda_{j, j'}^{ss'}(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ - коефіцієнт, який описує попарну взаємодію атомів у решітці, володіє властивостями симетрії та залежить лише від відстані між атомами відповідної пари. Рівняння руху відповідної системи виражається як

$$m_s \ddot{u}_{sj} = - \sum_{\mathbf{n}', s'} \Lambda_{j, j'}^{ss'}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') u_{s'j'}(\mathbf{n}') \quad (1.5)$$

Розв'язком рівняння (1.5) є монохроматична плоска хвиля

$$\mathbf{u}_s(t, \mathbf{n}) = \mathbf{e}_s(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n} - \omega t} \quad (1.6)$$

де $\mathbf{e}_s(\mathbf{k})$ - комплексна амплітуда коливань, яка також визначає їх напрямки поляризації. Система дисперсійних рівнянь для коливань кристалічної решітки має вигляд

$$\det \left| \Lambda_{j, j'}^{ss'}(\mathbf{k}) - \omega^2 m_s \delta_{jj'} \delta_{ss'} \right| \quad (1.7)$$

де

$$\Lambda_{j, k}^{ss'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \Lambda_{j, j'}^{ss'}(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n}} \quad (1.8)$$

Ця система має 3ν рівнянь, кожне з яких визначає залежність частоти від хвильового вектора, таким чином можливо розглядати частоту як багатозначну функцію

$$\omega = \omega_\alpha(\mathbf{k}) \quad (1.9)$$

де коефіцієнт α має 3ν можливих значень та позначає індекс відповідної гілки функції частоти. Із симетрії механічних рівнянь руху по відношенню до зміни знаку часу слідує, що функція (1.9) повинна бути парною

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) = \omega_\alpha(-\mathbf{k}) \quad (1.10)$$

Хвильовий вектор $\mathbf{k}$ впливає на зміщення (1.6) тільки як експоненційний множник, таким чином зміщення хвильового вектора на довільний вектор оберненої решітки $\mathbf{b}$ не приводить до змін

$$\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{b} \quad (1.11)$$

де

$$\mathbf{b} = p_1\mathbf{b}_1 + p_2\mathbf{b}_2 + p_3\mathbf{b}_3 \quad (1.12)$$

де p_1, p_2, p_3 - цілі числа. Таким чином хвильовий вектор коливань решітки заданий неоднозначно, а функція (1.9) являється періодичною

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) = \omega_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{b}) \quad (1.13)$$

і при розгляданні її фізичних властивостей достатньо розглядати кожну її гілку на проміжку значень хвильового вектора $\mathbf{k}$, обмеженому елементарною коміркою оберненої решітки. Значення функції частоти на такому інтервалі формують на кожній гілці зону кінцевої ширини [4; 5]. У сукупності ці зони формують чотиривимірну гіперповерхню, яка ілюструє повну залежність частоти від хвильового вектора. Серед гілок функції частоти існують три, які задані однорідною функцією першого порядку f від

змінної $\mathbf{k}$

$$\omega(\mathbf{k}) = kf\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right) \quad (1.14)$$

та дотримуються умови

$$\omega(\mathbf{k} = 0) = 0 \quad (1.15)$$

Хвилі, для яких виконуються умови (1.14) та (1.15) являються акустичними та описують коливання твердого тіла як суцільної середи. Акустичні хвилі у границі $\mathbf{k} \rightarrow 0$ переходять у паралельний зсув кристалічної решітки, без внутрішніх коливань.

Для кристалічних решіток, в елементарних комірках котрих більше одного атома, існують оптичні хвилі, які описують коливання атомів всередині комірок, для котрого

$$\omega(\mathbf{k} \rightarrow 0) = const \quad (1.16)$$

ти центр тяжіння комірок наближається до стану рівноваги. Кількість можливих оптичних коливань у решітці дорівнює 3ν , але всилу внутрішньої симетрії частина з них може бути виродженими. У околиці $\mathbf{k} = 0$ невироджені частоти коливань можуть бути розкладені в ряд по ступенях компонент вектора $\mathbf{k}$, в якому членами після другого ступеня можливо знехтувати

$$\omega = \omega_0 + \frac{1}{2}\gamma_{jj'}k_jk_{j'} \quad (1.17)$$

де ω_0 - гранична частота, $\gamma_{jj'}$ - сталі коефіцієнти.

Вироджені частоти коливань, в свою чергу, в околиці $\mathbf{k} = 0$ не можуть бути розкладені у ряд, а різниця $\omega - \omega_0$ буде задаватися функцією хвильового вектора $\mathbf{k}$ першого або другого порядку, залежно від симетрії кристалічної решітки.

1.3 Щільність станів

Кількість коливань, що припадає на інтервал $d^3k = dk_x dk_y dk_z$ значень координат простору оберненої кристалічної решітки, нормована на об'єм кристала, дорівнює $\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$. Коливання кристалічної решітки характеризуються функцією розподілення коливань по частотах $g(\omega)$, що при інтегруванні по заданому інтервалу частот, визначає кількість коливань у ньому. Кількість коливань на малому інтервалі частот $d\omega$ задається об'ємом оберненого простору, обмеженим двома нескінченно близькими ізочастотними $\omega(\mathbf{k} = \text{const})$ поверхнями. У кожній точці оберненого простору градієнт частоти $\omega(\mathbf{k})$ спрямовано вздовж нормалі ізочастотної поверхні, яка проведена через дану точку. Таким чином, шуканий об'єм оберненого простору [6] визначається як

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{df_{\mathbf{k}}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})|} \quad (1.18)$$

де $f_{\mathbf{k}}$ - площа елемента ізочастотної поверхні, а інтегрування проводиться у межах однієї елементарної комірки оберненої решітки.

1.4 Загальна теорія фононів

Для опису коливань частинок у твердому тілі з кристалічною решіткою використовуються фонони - квазічастинки, які характеризуються енергією та напрямком руху відповідної хвилі у твердому тілі. Енергія фонона ε задається як енергія квантового осцилятора з відповідною частотою ω

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (1.19)$$

подібно до визначення енергії фотонів [7], де $\hbar$ - зведена стала Планка. Хвильовий вектор хвилі $\mathbf{k}$ визначає квазіімпульс $\mathbf{p}$ відповідного фонона

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.20)$$

Квазіімпульс відрізняється від імпульсу тільки тим, що квазіімпульс визначається з точністю до сталого доданка вигляду $\hbar\mathbf{b}$, таким чином

$$\mathbf{p} = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{b} \quad (1.21)$$

Швидкість фонона $\mathbf{v}$ визначається груповою швидкістю відповідних класичних хвиль

$$\mathbf{v} = \frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{k}} \quad (1.22)$$

Вільному поширенню хвиль у гармонійному наближенні твердого тіла відповідає вільний рух фононів без взаємодії один з одним. Подальшим наближенням відповідає поява явища різноманітних зіткнень фононів між собою, що описує механізм виникнення теплової рівноваги газу фононів. Процеси взаємодії фононів дотримуються законів збереження енергії та квазіімпульсу. Виходячи з визначення квазіімпульсу, закон його збереження має вигляд

$$\sum \mathbf{p}_i = \sum \mathbf{p}'_i + \hbar\mathbf{b} \quad (1.23)$$

де $\mathbf{p}_i$ - квазіімпульси до взаємодії, $\mathbf{p}'_i$ - квазіімпульси після взаємодії.

У кожному елементу решітки, тобто у кожному квантовому стані, одночасно може бути збуджена необмежена кількість фононів, що робить газ фононів підпорядкованим статистиці Бозе-Ейнштейна. Повна кількість елементів газу фононів визначається лише умовами теплової рівноваги та не задана заздалегідь, що робить хімічний потенціал цього газу рівним нулю. Таким чином середню кількість фононів у кожному квантовому стані, за умови теплової рівноваги, визначає функція розподілу [8]

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{\varepsilon(\mathbf{p})T} - 1} \quad (1.24)$$

У випадку високих температур $T \gg \varepsilon$ розподіл Планку (1.24) спрощується до лінійної залежності від температури

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{T}{\varepsilon(\mathbf{p})} \quad (1.25)$$

Будь-яке слабе збудження стану мікроскопічного тіла можливо розглядати у квантовій механіці як сукупність окремих елементарних збуджень, наприкладі звукових хвиль у твердому тілі та фононів. Такі елементарні збудження будуть поводитися як квазічастинки які рухаються у просторі обмеженим геометрією тіла. У випадках, коли таких елементарних збуджень відносно мало, їх взаємодією між собою нехтують, розглядаючи їх сукупність як ідеальний газ квазічастинок.

Вільна енергія Гельмгольца ідеального газу фононів [1] задається як

$$\mathcal{F} = N\varepsilon_0 + T \sum_{\alpha=0}^{3\nu} \int \ln \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{T}} \right] \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} \quad (1.26)$$

де $\varepsilon_0 = \varepsilon_0\left(\frac{N}{V}\right)$ - енергія спокою атома у кристалічній решітці, ν - кількість атомів у одній комірці кристалічної решітки у стані спокою, а інтегрування проводиться по всім значенням $\mathbf{k}$ в одній комірці оберненою кристалічної решітки. Використовуючи функцію щільності станів (1.18) вираз вільної енергії Гельмгольца приймає вигляд

$$\mathcal{F} = N\varepsilon_0 + TV \sum_{\alpha=0}^{3\nu} \int \ln \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}{T}} \right] g_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (1.27)$$

Для опису нерівноважних макростанів твердого тіла використовується нерівноважний розподіл фононів оп квантовим станам. Для випадку великої кількості фононів, ентропія такого стану описується як

$$S = \sum_j G_j \ln \frac{eN_j}{G_j} \quad (1.28)$$

де N_j - кількість частинок у j -ой групі, G_j - кількість станів у j -ой групі. Кількість станів фононів, що припадають на інтервал хвильового вектора d^3k та елемент об'єму dV дорівнює

$$d\tau = \frac{d^3k dV}{(2\pi)^3} \quad (1.29)$$

Кількість фононів у відповідному інтервалі задається як

$$N_\alpha = \frac{U_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\hbar\omega_\alpha(\mathbf{k})} d\tau \quad (1.30)$$

де $U_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ - енергія теплових коливань в елементі фазового простору $d\tau$. Таким чином ентропія газу фононів у твердому тілі виражається через енергію теплових коливань як

$$S = \sum_{\alpha=1}^{3\nu} \int \ln \left[\frac{eU_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\hbar\omega_\alpha(\mathbf{k})} \right] d\tau \quad (1.31)$$

1.5 Рівняння руху фононів

Довільне коливання кристалічної решітки може бути розкладене у вигляді комбінації плоских хвиль. При розгляданні кристалічної решітки великих, але обмежених розмірів, хвильовий вектор $\mathbf{k}$ буде приймати лише дискретні значення, наближені по модулю. Функція зміщення атомів із рівноважного положення [9], у такому наближенні, буде мати вигляд

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=0}^{3\nu} \sum_{\mathbf{k}} (a_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n} + a_\alpha^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}_s^{(\alpha)*}(\mathbf{k}) \cdot e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_n}) \quad (1.32)$$

де N - кількість елементарних комірок у кристалі, $\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k})$ - вектори поляризації коливань, що задовольняють умовам

$$\sum_{s=1}^{\nu} \frac{m_s}{m} \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_s^{(\alpha')}(\mathbf{k})]^* = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (1.33)$$

$$\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(-\mathbf{k}) = [\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k})]^* \quad (1.34)$$

де $m = \sum m_s$ - повна маса атомів однієї комірки, $\delta_{\alpha\alpha'}$ - символ Кронекера. Коефіцієнт $a_\alpha(\mathbf{k})$ задовольняє рівняння

$$\ddot{a}_\alpha(\mathbf{k}) + \omega_\alpha^2(\mathbf{k})a_\alpha(\mathbf{k}) = 0 \quad (1.35)$$

та використовується у функції (1.32) у формі [10]

$$a_\alpha(\mathbf{k}) \sim e^{-i\omega_\alpha(\mathbf{k})t} \quad (1.36)$$

що робить кожен член суми (1.32) залежним лише від $\mathbf{k}\mathbf{r}_n - \omega_\alpha(\mathbf{k})t$, дозволяючи розглядати його як плоску хвилю, яка рухається у напрямку $\mathbf{k}$.

Вклад коливань решітки кристала в енергію виражається за формулою (1.4). Використовуючи властивість експоненціального множника

$$\sum_{\mathbf{n}} e^{iq\mathbf{r}_n} = \begin{cases} N & , q = 0 \\ 0 & , q \neq 0 \end{cases} \quad (1.37)$$

кінетична енергія коливань може бути виражена як

$$E_k = \sum_{\alpha\mathbf{k}} m\omega_\alpha^2(\mathbf{k}) \left[a_\alpha(\mathbf{k}) \cdot a_\alpha^*(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}(a_\alpha(\mathbf{k}) \cdot a_\alpha(-\mathbf{k}) + a_\alpha^*(\mathbf{k}) \cdot a_\alpha^*(-\mathbf{k})) \right] \quad (1.38)$$

а потенційна -

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}s} m_s \ddot{\mathbf{u}}_s(\mathbf{n}) \mathbf{u}_s(\mathbf{n}) \quad (1.39)$$

Повна енергія коливання фононів може бути виражена у вигляді

$$E = \sum_{\alpha\mathbf{k}} 2m\omega_\alpha^2(\mathbf{k}) |a_\alpha(\mathbf{k})|^2 \quad (1.40)$$

Використовуючи вираз (1.40), гамільтоніан системи фононів задається як

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\mathbf{k}} \left[P_\alpha^2(\mathbf{k}) + \omega_\alpha^2(\mathbf{k}) Q_\alpha^2(\mathbf{k}) \right] \quad (1.41)$$

де

$$Q_\alpha(\mathbf{k}) = \sqrt{m}(a_\alpha(\mathbf{k}) + a_\alpha^*(\mathbf{k})) \quad (1.42)$$

$$P_\alpha(\mathbf{k}) = -i\omega_\alpha(\mathbf{k})\sqrt{m}(a_\alpha(\mathbf{k}) - a_\alpha^*(\mathbf{k})) \quad (1.43)$$

узагальнені змінні координати та імпульсу, відповідно. Узагальненні змінні

$Q_\alpha(\mathbf{k})$ та $P_\alpha(\mathbf{k})$ при переході до квантової теорії [7; 8] грають роль операторів з комутатором

$$[\hat{P}_\alpha(\mathbf{k}), \hat{Q}_\alpha(\mathbf{k})] = -i\hbar \quad (1.44)$$

Функція Гамільтону у квантовому розгляданні переходить до оператора

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\mathbf{k}} [\hat{P}_\alpha^2(\mathbf{k}) + \omega_\alpha^2(\mathbf{k}) \hat{Q}_\alpha^2(\mathbf{k})] \quad (1.45)$$

власні значення якого виражаються як

$$E = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \hbar\omega_\alpha(\mathbf{k}) \left(n_\alpha(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right) \quad (1.46)$$

де $n_\alpha(\mathbf{k})$ - номер стану, що приймає цілі значення починаючи з нуля.

Зміна станів описується операторами народження

$$\hat{c}_\alpha^+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\alpha(\mathbf{k})}} [\omega_\alpha(\mathbf{k}) \hat{Q}_\alpha(\mathbf{k}) - i\hat{P}_\alpha(\mathbf{k})] \quad (1.47)$$

та зникнення

$$\hat{c}_\alpha^-(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\alpha(\mathbf{k})}} [\omega_\alpha(\mathbf{k}) \hat{Q}_\alpha(\mathbf{k}) + i\hat{P}_\alpha(\mathbf{k})] \quad (1.48)$$

які описують появу та зникнення одного фонона у системі.

Оператор зміщення, використовуючи (1.47) та (1.48), може бути записаний як

$$\hat{\mathbf{u}}_s(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2mN}} \sum_{\alpha\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\omega_\alpha(\mathbf{k})}} \left[\hat{c}_\alpha^+(\mathbf{k}) \mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n}} + \hat{c}_\alpha^-(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_s^{(\alpha)}(\mathbf{k})]^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\mathbf{n}} \right] \quad (1.49)$$

1.6 Теплові властивості графену

Графен є одним з алотропів вуглецю. Даний матеріал уявляє собою двовимірні шари sp^2 -гібридизованих атомів вуглецю [11]. З точки зору своїх теплових властивостей графен цікавий впливом режиму транспортування фононів та механізму їх розсіювання на теплопровідність, та її сильна за-

лежність від підкладки [12].

Теплопровідність визначається як числовий коефіцієнт κ у рівнянні, яке описує закон Фур'є [13]

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (1.50)$$

де $\mathbf{q}$ - тепловий потік, ∇T - градієнт температури.

Теплопровідність ізолюваного графену вздовж площини дуже висока, вища за 2000 Вт/(м·К) при кімнатній температурі [14], у той час, як тепловий потік у поперечному напрямку майже в 1000 разів слабший, обмежений взаємодією ван дер Ваальса з навколишнім середовищем [15; 16].

З вимірювання теплопровідності графену [17–21] стає очевидним, що всі фактори, такі як форма та товщина, впливають на теплопровідність графену. Загалом, розмір графену в напрямку теплопередачі позитивно корелює з теплопровідністю: чим більший лінійний розмір графену, тим вища теплопровідність; коли графен знаходиться на підкладці, підкладка має великий вплив на теплопровідність. Це пояснюється тим, що взаємодія між графеном і підкладкою призводить до змін постійної решітки графену. Температура також має значний вплив на величину теплопровідності - теплопровідність збільшується з довжиною графенових нанострічок у всьому діапазоні температур.

1.7 Висновки розділу

У цьому розділі представлені основні концепції, на основі яких розглядається механізм теплопровідності на атомарно-молекулярному рівні. Було сконцентровано увагу на квантовому розгляданні передачі всередині твердого тіла з кристалічною структурою - моделі фононів. Фононе розглядає процесів теплообміну дозволяє досягти високої точності при роботі у мікромасштабах. Також були розглянуті теплові властивості графену, які будуть використані для порівняння результатів розв'язання основної задачі диплома.

2 Теоретична модель теплопроводності

2.1 Модель Казимира

Модель Казимира [22] описує теплопровідність кристалів у випадку малої, у порівнянні з розмірами кристала, довжини середнього вільного пробігу. Модель передбачає нехтування взаємодією між хвилями всередині кристалу, що дозволяє порівняти його з простором наповненим електромагнітним випромінюванням. Тільки взаємодія з матеріальним тілом може привести такий простір до стану статистичної рівноваги. Кристал у даній моделі описується як два такі простора, обмежених абсолютно чорними стінами та з різними температурами, сполучені довгою та вузькою камерою. Кількість електромагнітної енергії, що проходить крізь камеру, залежить особливостей стінок камери. У випадку циліндричної камери з абсолютно дзеркальними стінками, уся енергія, що потрапляє до одного кінця камери, буде передаватися на інший кінець камери. У випадку дифузійного розсіювання світла по стінках камери, щільність станів задається як

$$g = \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3} \right) \nu^2 d\nu d\Omega \quad (2.1)$$

де v_i проєкція швидкості, n розмірність системи, $d\Omega$ тілесний кут. При низьких температурах щільність енергії цих станів задається як

$$\mathcal{E} = \frac{\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^4 \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3} \right) d\Omega \quad (2.2)$$

де k_B стала Больцмана, h стала Планка, T температура. Енергія, яка закривається кутом θ задається як

$$\mathcal{E} = \frac{\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^4 \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3} \right) \cos \theta d\Omega \quad (2.3)$$

та дорівнює випромінюванню абсолютно чорного тіла при температурі T або абсолютно білого тіла у пустому просторі. При наявності постійного градієнта температури $\frac{dT}{dz}$ у циліндричній камері, кожен елемент площі

її стінок буде випромінювати кількість енергії, яка дорівнює поглинутій енергії. Потік тепла у такій системі являється сталим. Таким чином потік тепла, що характеризує систему дорівнює

$$\mathcal{Q} = \frac{4\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^3 \frac{dT}{dz} \int \int \int \int \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{r_{1,2}^2} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3} \right) d\sigma_1 d\sigma_2 \quad (2.4)$$

де σ_1 елемент площини стінки камери, σ_2 елемент площини поперечного перетину камери, $r_{1,2}^2$ відстань між σ_1 та σ_2 , кут між $r_{1,2}^2$ та нормаллями до площин σ_1 та σ_2 відповідно. Інтегрування проводиться по всій довжині камери. Нехтуючи залежність $\left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3} \right)$ від напрямку поширення, замінюємо її на середнє значення

$$\mathcal{Q} = \frac{4\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^3 \frac{dT}{dz} \int \int \int \int \frac{\cos \theta_1 \cos \theta_2}{r_{1,2}^2} \left(\overline{\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3}} \right) d\sigma_1 d\sigma_2 \quad (2.5)$$

Інтегруючи (2.5) отримаємо

$$\mathcal{Q} = \frac{4\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^3 \left(\overline{\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3}} \right) \frac{4\pi^3 R^3}{3} \frac{dT}{dz} \quad (2.6)$$

Питома тепломісткість системи задається як

$$C_V = \frac{4\pi^4}{15} \frac{k_B^4}{h^3} T^3 4\pi \left(\overline{\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i^3}} \right) \quad (2.7)$$

для випадку прямокутної камери.

Довжина середнього вільного пробігу фононів у моделі Казиміра [23] виражається як

$$\Lambda_C = 2R \quad (2.8)$$

для циліндричного провідника, де R - радіус циліндру. Для провідника з квадратним поперечним перетином середній вільний пробіг має вигляд

$$\Lambda_C = \frac{D}{2} \left[3 \ln 1 + \sqrt{2} - \sqrt{2} + 1 \right] \approx 1.115D \quad (2.9)$$

де D - бічна сторона перетину.

Модель Казимира дає задовільні результати для оцінки вільного пробігу фононів лише у тривимірному випадку, як продемонстровано у [24], у випадку двовимірної нанострічки спостерігається сильне розходження з експериментальними даними.

2.2 Модель абсолютно дзеркального відбиття

Модель [25] розглядає циліндричну камеру відкриту з обох кінців до середовищ з різними температурами. Камери розміщена у вакуумі, що забезпечує теплообмін лише за допомогою теплового випромінювання. До стінок камери постійно рівномірно подається фіксована кількість тепла. Теплопровідність всередині стін камери вздовж осі нехтується. Стінки камери вважаються сірими та дзеркально відбивають випромінювання. Енергія взаємообміну випромінювання задається лінійним інтегральним рівнянням Фредгольма.

Рівняння енергії задаються тепловим балансом у циліндричному елементі зони диференціювання dA_X розміщений у точці X внутрішньої площини камери Рис.2.1. Енергія, яка випромінюється таким елементом площини дорівнює

$$\epsilon\sigma T_{\omega}^4(X)dA_X \quad (2.10)$$

Енергія, яку отримує дана зона, складається з трьох компонентів. В першу чергу це постійний потік тепла, що подається до стінок камери

$$qdA_X \quad (2.11)$$

У другу - це випромінювання навколишнього середовища, яке проникає з відкритих кінців камери. Припускається, що навколишнє середовище може бути представлено чорною площиною на кожному кінці камери. Таким чином випромінювання, що попадає через обидва кінці камери розповсюджено рівномірно та розсіяно вздовж площин, на кінцях камери. Фактор взаємообміну дзеркально відбитого випромінювання між елементом площини dA_X та лівим кінцем камери позначається як $M(X)$. Здатність погли-

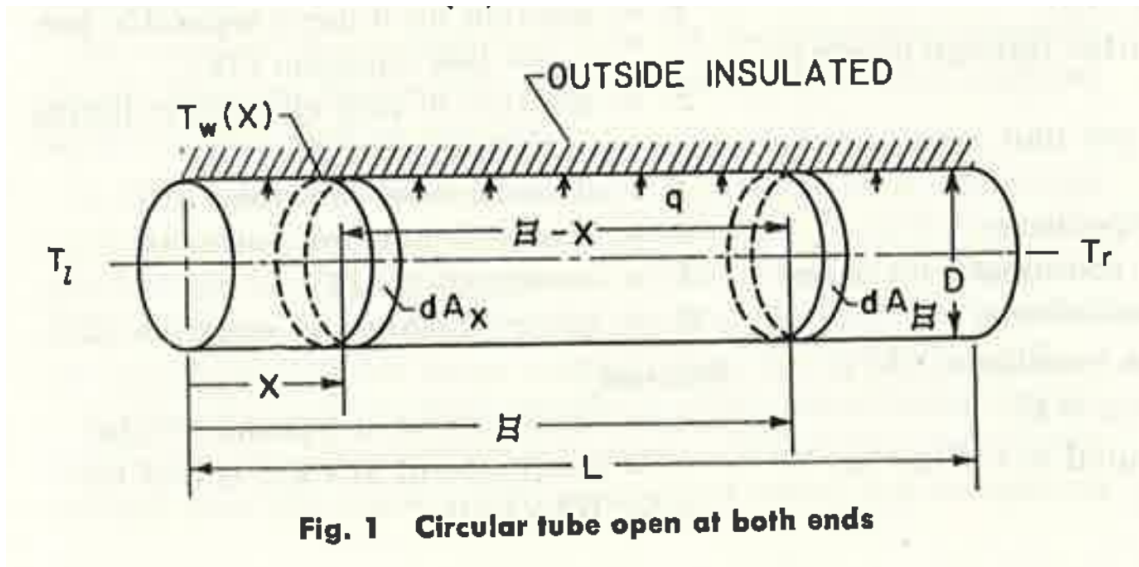


Рис. 2.1. Циліндрична камера відкрита з обох сторін [25]

нання поверхні камери вважається постійною та рівною випромінювальній здатності поверхні ϵ . Щільність випромінювання від лівого кінця камери дорівнює σT_l^4 на одиницю площі. Частина цього випромінювання, яка падає на площу dA_X та поглинається задається як

$$\epsilon \sigma T_l^4(X) M(X) dA_X \quad (2.12)$$

де σ стала Стефана — Больцмана. Аналогічно, випромінювання, яке падає та поглинається тією ж площиною від правого кінця камери, задається як

$$\epsilon \sigma T_r^4(X) M(L - X) dA_X \quad (2.13)$$

Третя компонента енергії, яку отримає дана зона, це енергія яка надходить у вигляді відбитого випромінювання від інших елементів поверхні камери. Фактор взаємообміну випромінювання між двома елементами на відстані Z один від одного позначається як $G(X)$. Таким чином енергія, що випромінюється елементом площини у точці Xi , та падає та поглинається елементом площини dA_X задається як

$$\epsilon^2 \sigma T_w^4 \left(\frac{\Xi}{D} \right) G \left(\frac{\Xi - X}{D} \right) dA_X d\frac{\Xi}{D} \quad (2.14)$$

де D діаметр камери. Енергія випромінювання, яке відбивається від усієї

площини камери та потрапляє у даний елемент знаходиться шляхом інтегрування (2.14) по всій довжині камери

$$dA_X \int_0^{\frac{X}{D}} \epsilon^2 \sigma T_\omega^4 \left(\frac{\Xi}{D} \right) G \left(\frac{\Xi - X}{D} \right) d\frac{\Xi}{D} + dA_X \int_{\frac{X}{D}}^{\frac{L}{D}} \epsilon^2 \sigma T_\omega^4 \left(\frac{\Xi}{D} \right) G \left(\frac{\Xi - X}{D} \right) d\frac{\Xi}{D} \quad (2.15)$$

Таким чином маючи вираз для випромінювання, яке виділяється (2.10) та поглинається (2.11), (2.12), (2.13), (2.15), рівняння теплового балансу може бути записано як

$$\begin{aligned} \epsilon \sigma T_\omega^4(X) = q + \epsilon \sigma T_l^4(X) M(X) + \epsilon \sigma T_r^4(X) M(L - X) + \\ + \int_0^{\frac{X}{D}} \epsilon^2 \sigma T_\omega^4 \left(\frac{\Xi}{D} \right) G \left(\frac{\Xi - X}{D} \right) d\frac{\Xi}{D} + \int_{\frac{X}{D}}^{\frac{L}{D}} \epsilon^2 \sigma T_\omega^4 \left(\frac{\Xi}{D} \right) G \left(\frac{\Xi - X}{D} \right) d\frac{\Xi}{D} \end{aligned} \quad (2.16)$$

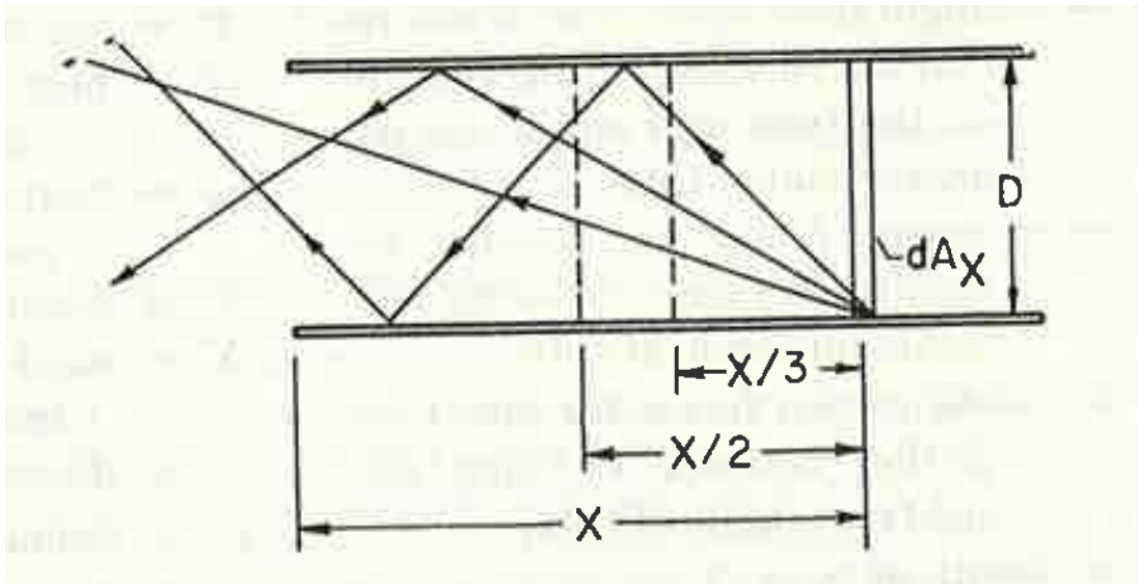


Рис. 2.2. Циліндрична камера відкрита з обох сторін [25]

Фактор прямого взаємообміну випромінювання між елементом поверхні та лівим кінцем камери виражається як

$$F(X) = \frac{\left(\frac{X}{D}\right)^2 + \frac{1}{2}}{\left[\left(\frac{X}{D}\right)^2 + 1\right]^{\frac{1}{2}}} - \frac{X}{D} \quad (2.17)$$

Випромінювання енергії з елемента поверхні у точці X та проходить на-

пряму через поперечний перетин камери на відстані $\frac{X}{2}$ можливо поділити на дві частини Рис.2.2. Перша частина залишить відкритий кінець камери напряду, без відбиттів від стінок камери. Друга частина цієї енергії залишить відкритий кінець камери після одного відбиття від поверхні камери. Випромінювання з цієї ж точки X , яке відіб'ється від поверхні камери до того, як пройти через перетин $\frac{X}{2}$, потребує не менше двох відбиттів від стінок камери, перш ніж покинути її відкритий кінець. Таким чином, взаємообмін енергії випромінювання, що відбилося тільки один раз, між відкритим кінцем камери та елементом її поверхні дорівнює різниці між енергією випромінювання, що перетнула площину $\frac{X}{2}$, та енергією, що покинула відкритий кінець камери не відбиваючись від її стінок жодного разу

$$\epsilon \left[F\left(\frac{X}{2}\right) - F(X) \right] \quad (2.18)$$

Таким чином фактор взаємообміну для випромінювання для одного відбиття дорівнює

$$(1 - \epsilon) \left[F\left(\frac{X}{2}\right) - F(X) \right] \quad (2.19)$$

Аналогічні міркування чинні для випромінювання, яке відбилося від стінок камери два або більше разів.

Фактор взаємообміну випромінювання між елементом поверхні та лівим кінцем камери, яке відбилося n разів виражається як

$$(1 - \epsilon)^n \left[F\left(\frac{X}{n+1}\right) - F\left(\frac{X}{n}\right) \right] \quad (2.20)$$

Таким чином повний фактор $M(X)$ виражається як

$$M(X) = F(X) + \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \epsilon)^n \left[F\left(\frac{X}{n+1}\right) - F\left(\frac{X}{n}\right) \right] \quad (2.21)$$

Аналогічно виражається фактор взаємообміну для правого кінця

$$M(L - X) = F(L - X) + \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \epsilon)^n \left[F\left(\frac{L - X}{n+1}\right) - F\left(\frac{L - X}{n}\right) \right] \quad (2.22)$$

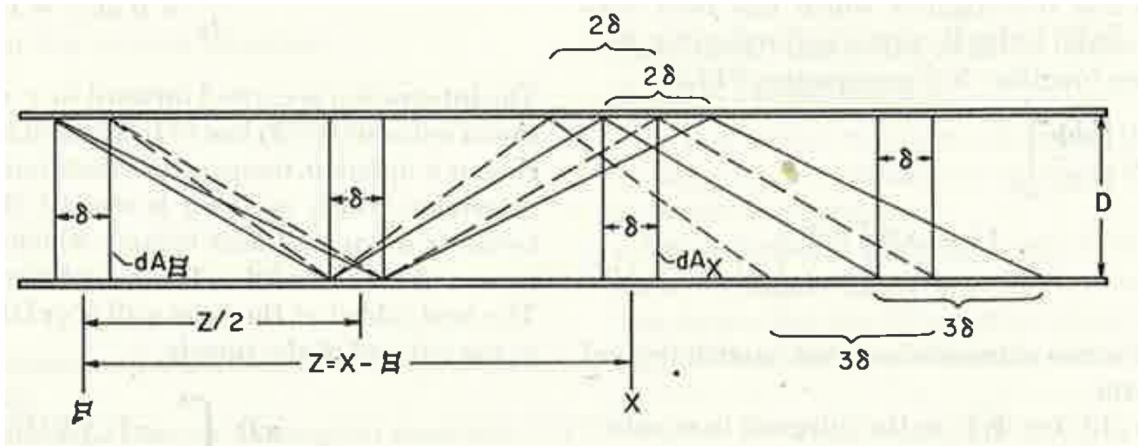


Рис. 2.3. Циліндрична камера відкрита з обох сторін [25]

Фактор прямого взаємообміну між двома елементами поверхні виражається як

$$K(Z) = 1 - \frac{\left(\frac{Z}{D}\right)^2 + \frac{3Z}{2D}}{\left[\left(\frac{Z}{D}\right)^2 + 1\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.23)$$

де Z модуль відстані між елементами поверхні.

Випромінювання енергії з елемента поверхні dA_{Ξ} може досягти елемента поверхні dA_X , відіб'ється від стінок камери один раз, якщо це відбиття відбудеться від елемента поверхні dA_Z на середині відстані між dA_{Ξ} та dA_X Рис.2.2. Для випромінювання енергії, що виходить з елемента площини dA_{Ξ} та потрапляє прямо на елемент площини $dA_{\frac{Z}{2}}$, фактор взаємообміну дорівнює $K\left(\frac{Z}{2}\right)$. Частина цього випромінювання, яка дзеркально відбивається, задається як

$$(1 - \epsilon)K\left(\frac{Z}{2}\right) \quad (2.24)$$

Випромінювання із зони dA_{Ξ} , яке дзеркально відбилося у зоні $dA_{\frac{Z}{2}}$, тієї ж ширини δ , буде покривати вдвічі більшу зону на відстані X . Таким чином, припустивши що випромінювання з елемента площини dA_{Ξ} є рівномірним, тільки половина цього випромінювання буде потрапляти у зону dA_X , шириною δ . Отриманий вираз для фактора взаємообміну випромінювання,

яке дзеркально відбилося один раз, має вигляд

$$\frac{(1 - \epsilon)}{2} K\left(\frac{Z}{2}\right) \quad (2.25)$$

Аналогічні міркування чинні для випромінювання, яке відбилося від стінок камери два або більше разів.

Фактор взаємообміну випромінювання між двома елементами поверхні, яке відбилося n разів виражається як

$$\frac{(1 - \epsilon)^n}{n + 1} K\left(\frac{Z}{n + 1}\right) \quad (2.26)$$

Повний фактор $G(Z)$ має вигляд

$$G(Z) = K(Z) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - \epsilon)^n}{n + 1} K\left(\frac{Z}{n + 1}\right) \quad (2.27)$$

У випадку підтримання навколишнього середовища при температурі $T_l = T_r = 0$ рівняння теплового балансу (2.16) спрощується до

$$\epsilon \theta(x) = 1 + \epsilon^2 \int_0^x \theta(\xi) G(x - \xi) d\xi + \epsilon^2 \int_x^l \theta(\xi) G(x - \xi) d\xi \quad (2.28)$$

де $\theta = \frac{\sigma T_\omega^4}{q}$ безрозмірна температура, $x = \frac{X}{D}$ та $\xi = \frac{\Xi}{D}$ - безрозмірні координати.

У випадку, коли до стінок не підводиться тепло, температура середовища справа підтримується рівною нулю, а зліва - заданому значенню, рівняння теплового балансу (2.16) спрощується до

$$\theta_\epsilon(x) = M(x) + \epsilon \int_0^x \theta_\epsilon(\xi) G(x - \xi) d\xi + \epsilon \int_x^l \theta_\epsilon(\xi) G(x - \xi) d\xi \quad (2.29)$$

де $\theta_\epsilon = \frac{T_\omega^4}{T_l^4}$ безрозмірна температура. Використовуючи значення температур для найпростіших випадків (2.28) та (2.29), загальне рівняння теплового балансу (2.16) може бути виражено як

$$\sigma T_\omega^4(x) = q\theta(x) + \sigma(T_l^4 - T_r^4)\theta_\epsilon + \sigma T_r^4 \quad (2.30)$$

де

$$\mathbf{v}_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \mathbf{k} \quad (2.35)$$

- групова швидкість фононів.

Вважається що джерела тепла мають необмежену теплоємність та підтримуються при постійних температурах T_h - для гарячого та T_c - для холодного. При таких умовах тепловий потік, який випромінюють стінки камери, визначається законом випромінювання абсолютно чорного тіла

$$Q_{BBR} = \int \hbar \omega (\mathbf{v}_{gr} \mathbf{e}) n(T) d\Gamma = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \varphi d\varphi \int_0^\infty \hbar \omega \mathbf{v}_{gr} n(T) d\frac{kdk}{(2\pi)^2} \quad (2.36)$$

де $\mathbf{e}$ - нормаль до площини, що випромінює. Використовуючи поняття ефективної швидкості фононів

$$V_{eff} = \frac{\int \hbar \omega \mathbf{v}_{gr}(\omega) n(T) d\Gamma}{\int \hbar \omega n(T) d\Gamma} \quad (2.37)$$

(2.36) може бути заданий у вигляді

$$Q_{BBR} = \frac{1}{\pi} V_{eff} E \quad (2.38)$$

У випадку, коли стінки провідника повністю поглинають падаюче на них випромінювання, потік тепла у провіднику буде визначатися лише фононами, які випромінюються гарячою стінкою та попадають прямо на холодну. В такому випадку густина потоку тепла визначається лишу різницею між тепловим випромінюванням гарячої та холодної стінок

$$Q_0 = Q_{BBR}(T_h) R_0 - Q_{BBR}(T_c) R_0 \quad (2.39)$$

де

$$R_0 = \frac{1}{W} \int_0^W r_0(x) dx \quad (2.40)$$

- середнє значення функції $r_0(x)$, яка описує частину енергії, що проходить крізь провідник не взаємодіючи зі стінками

$$\begin{aligned}
 r_0(x) &= \frac{\int_{-\varphi_2}^{\varphi_1} \cos \varphi d\varphi \int_0^\infty \hbar \omega \mathbf{v}_{gr} n(T) d\frac{kd k}{(2\pi)^2}}{\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \varphi d\varphi \int_0^\infty \hbar \omega \mathbf{v}_{gr} n(T) d\frac{kd k}{(2\pi)^2}} = \\
 &= \frac{\int_{-\varphi_2}^{\varphi_1} \cos \varphi d\varphi}{\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \varphi d\varphi} = \frac{1}{2} \left(\int_0^{\varphi_1} \cos \varphi d\varphi + \int_0^{\varphi_2} \cos \varphi d\varphi \right) \quad (2.41)
 \end{aligned}$$

де кути, які обмежують фонони, які проходять напряду крізь провідник

$$\operatorname{tg} \varphi_1 = \frac{W - x}{L} \quad (2.42)$$

$$\operatorname{tg} \varphi_2 = \frac{x}{L} \quad (2.43)$$

Вираз для R_0 у параметрах L та W має вигляд

$$R_0 = \frac{W}{L + \sqrt{W^2 + L^2}} \quad (2.44)$$

Таким чином у випадку малої різниці температур, вираз (2.39) апроксимується виразом

$$Q_0 \approx \frac{1}{\pi} V_{eff} \frac{dE}{dT} (T_h - T_c) R_0 = \frac{1}{\pi} V_{eff} C_S (T_h - T_c) R_0 \quad (2.45)$$

$$Q_0 = \kappa_{eff} \frac{T_h - T_c}{L} \quad (2.46)$$

де

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{2} C_S V_{eff} \Lambda_0 \quad (2.47)$$

коефіцієнт пропорційності між густиною теплового потоку та різницею тем-

пературі, де

$$\Lambda_0 = \frac{2}{\pi} L R_0 = \frac{2}{\pi} \frac{LW}{L + \sqrt{W^2 + L^2}} \quad (2.48)$$

ефективний вільний пробіг фононів у системі. У випадку провідника великої ширини W , у порівнянні з довжиною L , бічними стінками провідника можливо нехтувати та потік тепла не буде залежати від довжини провідника L

$$Q_0 = \frac{1}{\pi} V_{eff} C_S (T_h - T_c) \quad (2.49)$$

Потік тепла (2.49) описує абсолютно балістичний випадок перенесення фононів.

У випадку провідника великої довжини L , у порівнянні з шириною W , вираз (2.48) для вільного пробігу фононів приймає вигляд

$$\Lambda_0(W \rightarrow 0) = \frac{1}{\pi} W \quad (2.50)$$

що описує довжину вільного пробігу, усереднену за всіма фононами. Реальна довжина вільного пробігу фононів у даному випадку буде меншою, оскільки лише мала частина фононів буде досягати протилежної сторони провідника. У випадку великої довжини провідника, градієнтом температури всередині нього неможливо нехтувати, тому рівняння теплового потоку приймає вигляд

$$\mathbf{Q}_0 = -\kappa_{eff} \nabla T(z) \quad (2.51)$$

У випадку ізотропного дифузійного розсіювання на границі, всі відбиття вважаються пружним, тому розподілення енергії фононів залишається незмінним [28]. На відміну від моделі Казіміра [22], де розглядається поглинання і випромінювання фононів абсолютно чорним тілом, дана модель розглядає пружне відбиття тих самих фононів від шорсткої поверхні у рівномірно розподілених кутах. Надалі у моделі розглядаються

нормалізований тепловий потік

$$q = \frac{Q - Q_{BBR}(T_c)}{Q_{BBR}(T_h) - Q_{BBR}(T_c)} \quad (2.52)$$

та нормалізована температура

$$t(z) = \frac{T(z) - T_c}{T_h - T_c} \quad (2.53)$$

Тепловий потік фононів, які випромінюються гарячою стіною та досягають холодної стіни, не взаємодіючи з боковими стінками, виражається як

$$q_{c0} = R_0 = \frac{1}{W} \left[\sqrt{W^2 + L^2} - L \right] \quad (2.54)$$

Щільність станів фононів, відбилися від стінок провідника один раз, виражається як

$$\tilde{g}_1(z, \varphi) dz d\varphi = \frac{\sin \varphi}{2W} \Theta(\varphi_m(z) - \varphi) dz d\varphi \quad (2.55)$$

де $\Theta(x) = \int_{-\infty}^x \delta(t) dt$ - функція Гевісайда, φ - кут між імпульсом фононона та віссю провідника, $\varphi_m(z)$ - максимальний кут падіння фононів у точці простору z

$$\sin \varphi_m(z) = \frac{W}{\sqrt{W^2 + z^2}} \quad (2.56)$$

У випадку абсолютно ізотропного дифузійного розсіювання, щільність станів дзеркально відбитих фононів буде мати вигляд

$$g_1(z, \varphi) = g_1(z) \Theta(\pi - \varphi) = \frac{1}{2W} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} \right] \Theta(\pi - \varphi) \quad (2.57)$$

Частина цих фононів, що повертається назад та поглинається гарячою стінкою, дорівнює

$$q_{h1} = \int_0^L \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} \right] g_1(z) dz \quad (2.58)$$

Інша частина, що досягає холодної стінки, дорівнює

$$q_{c1} = \int_0^L \frac{1}{2} \left[1 - \frac{L-z}{\sqrt{W^2 + (L-z)^2}} \right] g_1(z) dz \quad (2.59)$$

Решта фононів відіб'ються від бічних стінок провідника другий раз, їх щільність станів виражається як

$$g_2(z) = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{W^2}{\left[W^2 + (z-z_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} g_1(z_1) dz_1 = P g_1 \quad (2.60)$$

де P - інтегральний оператор

$$P g_1 = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{W^2}{\left[W^2 + (z-z_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} g_1(z_1) dz_1 \quad (2.61)$$

Загальний тепловий потік, що падає на бічні стінки за рахунок цих фононів задається як

$$q_{s1} = \int_0^L \frac{1}{2} \left[\frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} + \frac{L-z}{\sqrt{W^2 + (L-z)^2}} \right] g_1(z) dz = \int_0^L g_2(z) dz \quad (2.62)$$

Таким чином закон збереження енергії системи формується як

$$q_{s1} + q_{h1} + q_{c1} = \int_0^L g_2(z) dz \quad (2.63)$$

Щільність станів фононів, що відбилися n -разів задається використовуючи (2.61) як

$$g_n(z) = P^{n-1} g_1(z) \quad (2.64)$$

З цього слідує, що щільність станів фононів, що взаємодіяли з боковими стінками провідника, виражається як

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} P^n g_1(z) \quad (2.65)$$

Рівняння (2.65) може бути задане у рекурсивній формі

$$G(z) = g_1(z) + PG(z) \quad (2.66)$$

що, використовуючи явний вид функції $g_1(z)$, та оператору P , приймає вигляд

$$G(z) = \frac{1}{2W} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^L \frac{W^2}{\left[W^2 + (z - z_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} G(z_1) dz_1 \quad (2.67)$$

Визначив температуру всередині провідника, як температуру абсолютно чорного тіла, що створює потік тепла з щільністю фононів (2.67), рівняння температури виражається як

$$t(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{W^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^L \frac{W^2}{\left[W^2 + (z - z_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} t(z_1) dz_1 \quad (2.68)$$

Використовуючи безмірний параметр відношення ширини до довжини провідника

$$\mathcal{W} = \frac{W}{L} \quad (2.69)$$

рівняння (2.68) може бути записано у вигляді

$$t(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\mathcal{W}^2}{\left[\mathcal{W}^2 + (z - z_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} t(z_1) dz_1 \quad (2.70)$$

2.4 Висновки розділу

У розділі представлені результати пошуку у літературі моделей фононої теплопровідності для різних випадків взаємодії фононів з границею тіла. Припущення, зроблені щодо цього, при формулюванні фізичної задачі кожної моделі, мали впливові наслідки на межі, у яких відповідна модель дає задовільні результати. Так розглядання взаємодії фононів зі стінками, як з абсолютно чорним тілом, дає задовільне описання теплових властивостей тривимірних кристалів з малим вільним пробігом фононів.

Розглядання дзеркального відбиття фононів дозволяє описувати теплові провідники з ізольованими стінками. Своєю чергою, модель, яка розглядає дифузійне розсіювання фононів на стінках, дає простий і точний опис для довгих прямих кристалічних структур.

3 Теплопровідність двовірної нанострічки

3.1 Температурний профіль нанострічки

Чисельний розв'язок рівняння профілю температури (2.70) двовимірного провідника у моделі [26], демонструє майже лінійну залежність температури від довжини, з малими відхиленнями на біля кінців зразка Рис.3.1. Таким чином для рівняння (2.70) можливо запропонувати наближений розв'язок вигляду

$$t^{(1)}(z) = \frac{1 + \mathfrak{t}(\mathcal{W})(1 - 2z)}{2} \quad (3.1)$$

де

$$\mathfrak{t}(\mathcal{W}) = \left[1 + \frac{4\mathcal{W}\sqrt{\mathcal{W}^2 + 1^2}}{1 + \mathcal{W} + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}} \right]^{-1} \quad (3.2)$$

визначає температурний градієнт всередині провідника [29].

Для знаходження більш точних наближень розв'язку рівняння (2.70) буде використовуватися ітераційний метод з лінійним початковим наближенням (3.1). Введемо поняття функцій неоднорідності та ядра інтеграла

$$\mathfrak{g}(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] \quad (3.3)$$

$$\mathfrak{h}(z) = \frac{\mathcal{W}^2}{2 \left[\mathcal{W}^2 + z^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \quad (3.4)$$

Використовуючи (3.3) та (3.4) виразимо рівняння (2.70) у загальній формі

$$t(z) = \mathfrak{g}(z) + \int_0^1 \mathfrak{h}(z - z_1) t(z_1) dz_1 \quad (3.5)$$

Функція неоднорідності (3.3) являється парною та може бути виражена з використанням своєї первісної як

$$d\mathfrak{H}(z) = \mathfrak{h}(z) dz \quad (3.6)$$

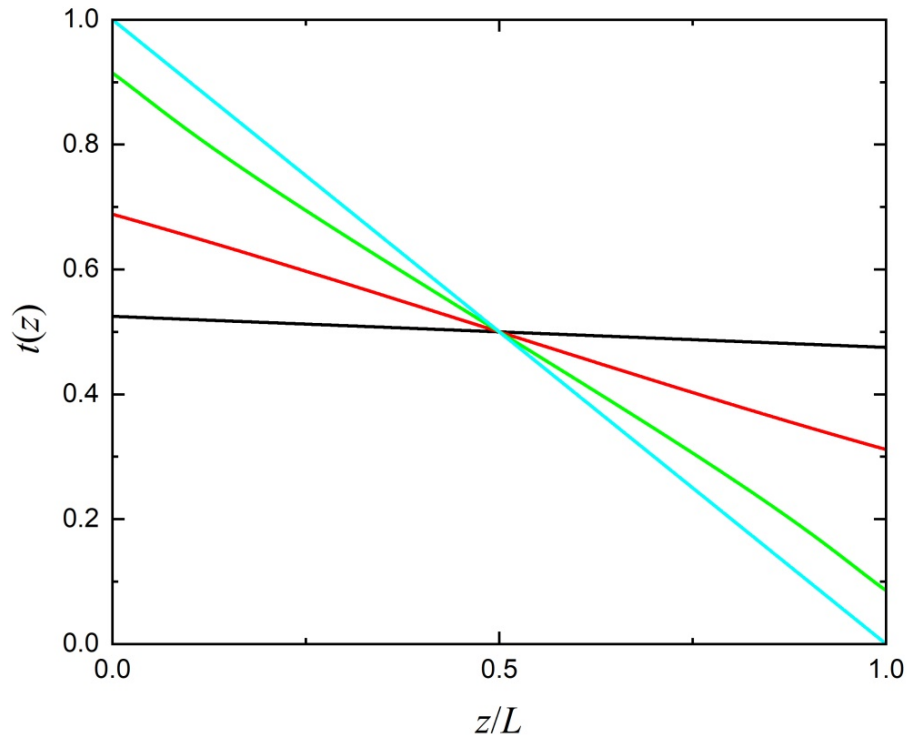


Рис. 3.1. Розв'язок рівняння (2.70) для різних $\mathcal{W}$. Чорна лінія $\mathcal{W} = 10$, червона лінія $\mathcal{W} = 1$, зелена лінія $\mathcal{W} = 0.1$, блакитна лінія - лінійна залежність з коефіцієнтом нахилу рівним одиниці [26].

де

$$\mathfrak{H}(z) = \frac{z}{2\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \quad (3.7)$$

Значення константи інтегрування не матиме впливу у подальших міркуваннях, тому воно буде прийнято за нуль. Це забезпечить значення первісної у нулі координат

$$\mathfrak{H}(z = 0) = 0 \quad (3.8)$$

Використовуючи (3.6) рівняння (3.5) може бути приведено до виду

$$t(z) = \mathfrak{g}(z) + \int_0^1 t(z_1) d\mathfrak{H}(z - z_1) \quad (3.9)$$

та застосувавши інтегрування по частинах

$$t(z) = \mathfrak{g}(z) + t(1)\mathfrak{H}(z-1) - t(0)\mathfrak{H}(z) - \int_0^1 \mathfrak{H}(z-z_1) \frac{d}{dz_1} t(z_1) dz_1 \quad (3.10)$$

Перейдемо до знаходження наближеного розв'язку (3.10), використовуючи лінійне наближення (3.1)

$$t(z) = \mathfrak{g}(z) + t(1)\mathfrak{H}(z-1) - t(0)\mathfrak{H}(z) + \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(z-z_1) dz_1 \quad (3.11)$$

де функція $\mathfrak{t}(\mathcal{W})$ задається різницею температур на кінцях зразка

$$\mathfrak{t}(\mathcal{W}) = t(0) - t(1) \quad (3.12)$$

Знайдемо граничні значення рівняння (3.11) у точках $z = 0$ та $z = 1$

$$t(0) = \mathfrak{g}(0) + \frac{1 - \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(-1) - \frac{1 + \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(0) + \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(-z_1) dz_1 \quad (3.13)$$

$$t(1) = \mathfrak{g}(1) + \frac{1 + \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(0) - \frac{1 - \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(1) + \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(1-z_1) dz_1 \quad (3.14)$$

Використовуючи властивості функції $\mathfrak{H}(z)$ спростуємо (3.14)

$$t(0) = \mathfrak{g}(0) + \frac{1 - \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(1) + \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(z_1) dz_1 \quad (3.15)$$

$$t(1) = \mathfrak{g}(1) - \frac{1 - \mathfrak{t}(\mathcal{W})}{2} \mathfrak{H}(1) - \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(z_1) dz_1 \quad (3.16)$$

Підставляючи (3.16) у рівняння (3.12) отримаємо

$$\mathfrak{t}(\mathcal{W}) = \mathfrak{g}(0) - \mathfrak{g}(1) - \mathfrak{t}(\mathcal{W})\mathfrak{H}(1) + 2\mathfrak{t}(\mathcal{W}) \int_0^1 \mathfrak{H}(z_1) dz_1 \quad (3.17)$$

Отримаємо явний вираз для функції градієнта температури

$$t(\mathcal{W}) = \frac{g(0) - g(1)}{1 + \mathfrak{H}(1) - 2 \int_0^1 \mathfrak{H}(z_1) dz_1} \quad (3.18)$$

Вираз для визначення функції різниці температури (3.18) не залежить від вигляду функцій і тому може використовуватися для тривимірного випадку з будь-якою формою поперечного перерізу. Для випадку двовимірного зразка (3.18) збігається з (3.2) отриманим у [29].

Наближене лінійне рішення (3.2) описує профіль температури досить точний, але його можна покращити за допомогою подальших ітерацій в інтегралі рівняння (2.70).

Ітераційний метод досить відомий [30] і полягає в тому, що результат наступного наближення визначається співвідношенням (2.70), в якому результат попередньої ітерації підставляється у праву частину. Ця ітераційна процедура найчастіше використовується для чисельного розв'язування інтегральних рівнянь типу (3.5). У даній роботі ми пропонуємо використовувати цю процедуру для отримання розв'язку в аналітичній формі. Другим наближенням для профілю температури (2.70) буде

$$t^{(2)}(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\mathcal{W}^2}{[\mathcal{W}^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} t^{(1)}(z_1) dz_1 \quad (3.19)$$

Використовуючи явний запис лінійного наближення (3.1), друге наближення можливо записати у формі

$$t^{(2)}(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\mathcal{W}^2}{[\mathcal{W}^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} \frac{1 + t(\mathcal{W})(1 - 2z_1)}{2} dz_1 \quad (3.20)$$

Розв'язавши інтеграл у (3.20) отримаємо

$$t^{(2)}(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{2\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} - \frac{z - 1}{2\sqrt{\mathcal{W}^2 + (z - 1)^2}} \right] - \frac{t}{2} \left[\frac{z^2 + \mathcal{W}^2 - \frac{z}{2}}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} - \frac{z(z - 1) + \mathcal{W}^2 + \frac{(z-1)}{2}}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + (z - 1)^2}} \right] \quad (3.21)$$

Розрахунок різниці температурних профілів, отриманих за допомогою апроксимацій (3.1) і (3.21) продемонстровані на Рис.3.2 для різних випадків відношення ширини до довжини $\mathcal{W}$ в діапазоні від 0.01 до 1. Можливо побачити, що відхилення між першим (3.1) та другим (3.21) наближеннями знаходиться в межах 0.4%.

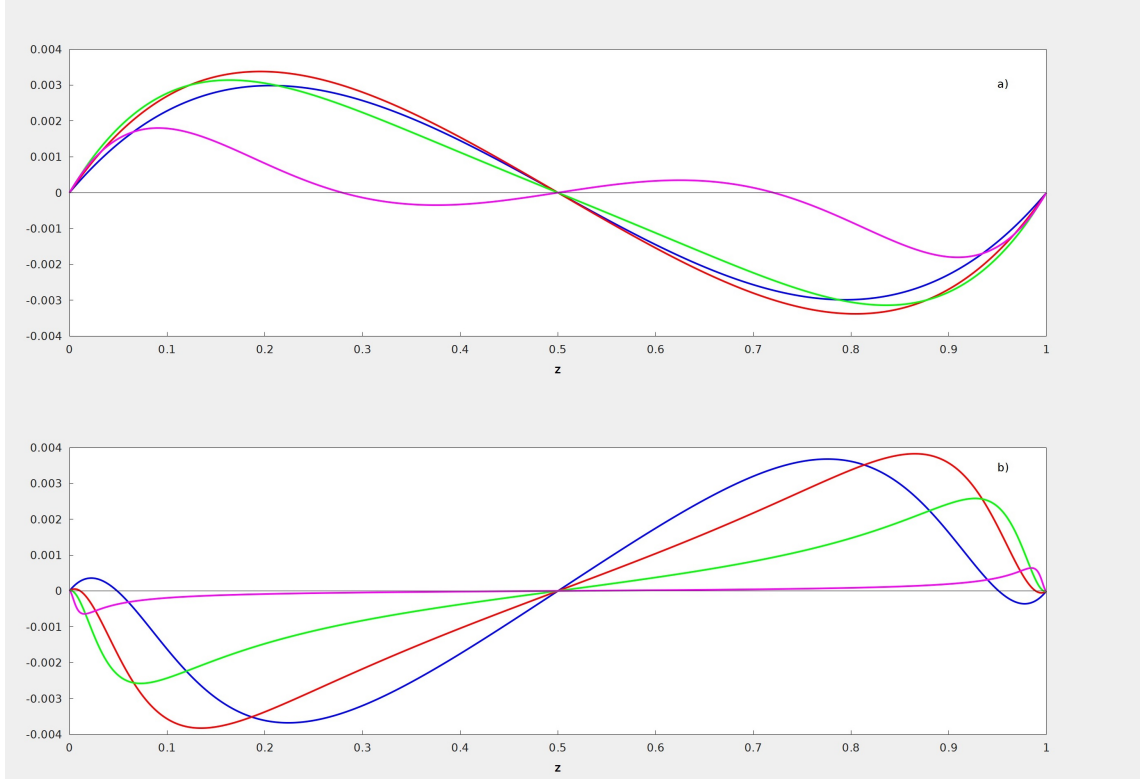


Рис. 3.2. Різниця наближень профілів температури провідника $t^{(2)}(z) - t^{(1)}(z)$: а) синя лінія $\mathcal{W} = 1$, червона лінія $\mathcal{W} = 0.8$, зелена лінія $\mathcal{W} = 0.6$, рожева лінія $\mathcal{W} = 0.4$; б) синя лінія $\mathcal{W} = 0.2$, червона лінія $\mathcal{W} = 0.1$, зелена лінія $\mathcal{W} = 0.05$, рожева $\mathcal{W} = 0.01$

Отриманий розв'язок передає особливості розв'язку [26] рівняння (2.70) зі значно вищою точністю, оскільки він описує невеликі відхилення від лінійного розв'язку (3.1). При необхідності ітераційну процедуру можна повторити необхідну кількість разів.

Температурний профіль $(n + 1)$ -ої ітерації, у цьому випадку, задається

$$t^{(n+1)}(z) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\mathcal{W}^2}{[\mathcal{W}^2 + (z - z_1)^2]^{\frac{3}{2}}} t^{(n)}(z_1) dz_1 \quad (3.22)$$

Варто зазначити, що цей метод, зокрема, дозволяє позбутися недоліків методів, які використовують розкладання в ряд Тейлора поблизу середини

відрізка [25], що призводить до асимптотичних рядів.

Порівняння $t(z)$ у кожній точці z не надає достатньо інформації о відносних значеннях послідовних ітерацій, особливо в околиці кінця зразка $z = 1$, де значення температури сходяться до нуля. Для цієї задачі розглянемо інтегральну величину

$$\tau = \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{(1)}(z) - t^{(2)}(z)}{t^{(1)}(z)} dz \quad (3.23)$$

чисельні розрахунки якої продемонстровані на Рис.3.3(а).

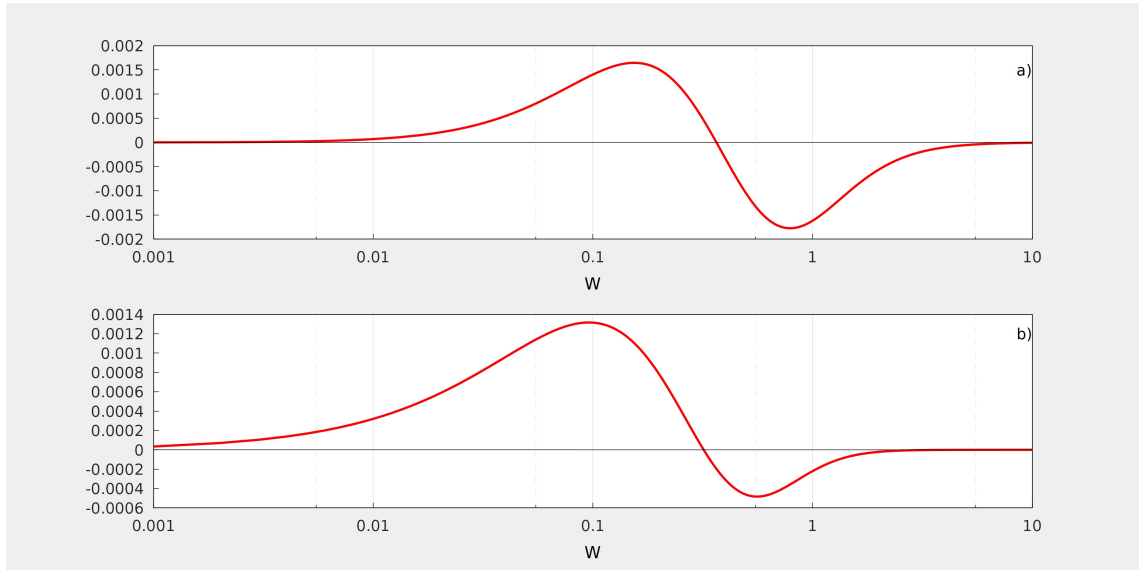


Рис. 3.3. а) Залежність τ від відношення ширини до довжини провідника $\mathcal{W} = W/L$; б) залежність ϵ від відношення ширини до довжини провідника $\mathcal{W} = W/L$

3.2 Тепловий потік

Завдяки наявності дифузійного відбиття від стінок, частина фоонів, що випромінюються нагрівачем, повернуться до нього. Цей процес обумовлює тепловий опір провідника [31]. Таким чином нормалізований потік тепла у провіднику буде меншим за одиницю.

Для визначення цього теплового потоку ми підставимо розподіл темпе-

ратури (2.70) у рівняння, яке визначає тепловий потік (2.58)

$$q_h = \int_0^1 \frac{1}{\mathcal{W}} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] t(z) dz \quad (3.24)$$

Загальний потік фононів через провідник, який досягає холодного резервуара, можна знайти зі співвідношення закону збереження потоку фононів

$$q_c = 1 - q_h \quad (3.25)$$

Для лінійного наближення профілю температури (3.1) ми отримаємо явний вираз для теплового потоку (3.24)

$$q_h^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{1 + \mathcal{W} + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}} + \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \left[1 - \mathcal{W} \ln \frac{1 + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}}{\mathcal{W}} \right] \right) \quad (3.26)$$

Відповідний потік (3.25) для лінійного наближення прийме вигляд

$$q_c^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{2\mathcal{W} + 2\sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}}{1 + \mathcal{W} + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}} - \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \left[1 - \mathcal{W} \ln \frac{1 + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}}{\mathcal{W}} \right] \right) \quad (3.27)$$

Для другого наближення (3.20) рівняння теплового потоку задається як

$$q_h^{(2)} = \int_0^1 \frac{1}{\mathcal{W}} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] t^{(2)}(z) dz \quad (3.28)$$

Рис.3.3(b) демонструє залежність відносної різниці між тепловими потоками, що формують тепловий опір, першого та другого наближення

$$\varepsilon = \frac{|q_c^{(2)} - q_c^{(1)}|}{q_c^{(2)}} \quad (3.29)$$

Відповідно до (3.24) тепловий потік (3.25) n -ої ітерації буде задаватися як

$$q_c^{(n)} = 1 - \int_0^1 \frac{1}{\mathcal{W}} \left[1 - \frac{z}{\sqrt{\mathcal{W}^2 + z^2}} \right] t^{(n)}(z) dz \quad (3.30)$$

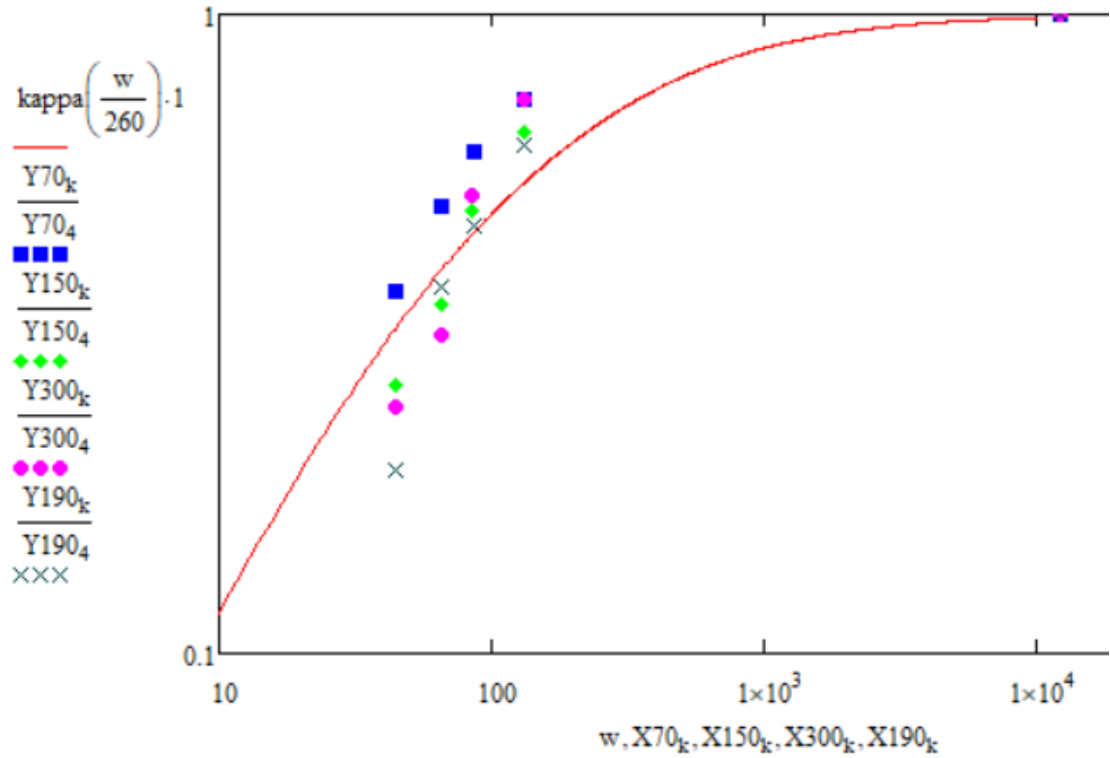


Рис. 3.4. Залежність коефіцієнта теплопровідності κ від відношення ширини W провідника довжиною $L = 260$ нм: червона лінія - експериментальні данні [14], сині квадратні маркери - розрахунки для $T = 70$ К, зелені маркери - розрахунки для $T = 150$ К, маркери-хрести - розрахунки для $T = 190$ К, рожеві маркери - розрахунки для $T = 300$ К. Всі дані нормалізовані для ширини $W = 1.2 \cdot 10^4$ нм.

Таким чином, розглядаючи градієнт температури, як різницю її значень на кінцях зразка, теплопровідність (1.50) даної нанострічки для n -ої ітерації буде виражатися як

$$\kappa^n = \frac{q_c^{(n)}}{t^{(n)}(0) - t^{(n)}(1)} \quad (3.31)$$

За визначенням, різниця нормалізованої температури (2.53) на кінцях провідника дорівнює $t^{(n)}(0) - t^{(n)}(1) = 1$, тому теплопровідність буде дорівнювати нормалізованому потоку тепла

$$\kappa^n(\mathcal{W}) = q_c^{(n)}(\mathcal{W}) \quad (3.32)$$

Таким чином для лінійного наближення коефіцієнт теплопровідності

буде задаватися як

$$\kappa^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\frac{2\mathcal{W} + 2\sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}}{1 + \mathcal{W} + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}} - \mathfrak{t}(\mathcal{W}) \left[1 - \mathcal{W} \ln \frac{1 + \sqrt{\mathcal{W}^2 + 1}}{\mathcal{W}} \right] \right) \quad (3.33)$$

Порівняння розрахунку в лінійному наближенні (3.33) з експериментальними даними [14] для графенових нанострічок різної ширини для чотирьох температур демонструється на Рис.3.4. При цьому як розрахункові, так і експериментальні дані нормуються на теплопровідність провідника нескінченної ширини. Як видно з графіка, досягається досить хороша згода між аналітичними розрахунками та експериментальними даними без використання будь-яких підгоночних параметрів. Спостережувана різниця може бути зумовлена як необхідністю врахування шорсткості на границях зразка [32–34], так і впливом температури [35].

3.3 Висновки розділу

В розділі розглянуто основну задачу диплома, а саме задачу про аналітичний ітеративний підхід для опису теплопровідності нанострічок. Сформовано рівняння, описуючи теплові процеси даної задачі. Розглянуто загальний метод знаходження температурного профілю твердого кристалічного тіла. Запропоновано метод знаходження теплових параметрів кристала з дифузним розсіюванням фононів на стінках довільної геометрії. Здобуто ітеративний вираз для теплопровідності нанострічки з дифузійним розсіюванням фононів на стінках. Проаналізовано відповідність розрахунків даної моделі з експериментальними даними на прикладі коефіцієнта теплопровідності графену.

Висновки

В дипломній роботі проведено дослідження теплових властивостей двовимірного кристала нанорозмірів. Зокрема, у дипломі проведено аналіз літератури, та складено огляд чинних методів розрахунку теплових параметрів кристалічних тіл. У роботі також наведено аналіз фононної моделі розглядання процесів теплообміну всередині твердих тіл. Були розглянуті теплові властивості графену.

Також в дипломі досліджено основні механізми формування теплового потоку всередині твердого тіла, для випадку домінування дифузійного розсіювання фононів на границях кристала, та запропоновано загальний ітераційний метод для знаходження основних теплових характеристик даного тіла, таких як температурний профіль та коефіцієнт теплопровідності. Проведені розрахунки вищеперелічених теплових параметрів для нанострічки прямокутної геометрії та порівняння отриманих результатів з експериментальними вимірюваннями даних параметрів для графену. Результати даного порівняння свідчать про доречність використання наведеної у дипломі моделі для опису фізики експерименту.

Таким чином в дипломі був запропоновано оригінальний метод розв'язування задачі аналітичного ітеративного підходу для опису теплопровідності наностричок та аналізовано фізичну область його застосування.

Результати роботи дозволяють зробити висновки про ефективність певних методів розрахунку теплових властивостей малих кристалів, а також запропонувати методологію проведення числових розрахунків та реальних експериментів, як для перевірки результатів роботи, так і для подальшого застосування цих результатів на практиці.

Список використаних джерел

1. *Ziman J. M.* Electrons and phonons: the theory of transport phenomena in solids. — Oxford university press, 2001.
2. *Kittel C., McEuen P.* Introduction to solid state physics. — John Wiley & Sons, 2018.
3. *Feynman R. P., Leighton R. B., Sands M.* The Feynman lectures on physics, Vol. I: The new millennium edition: mainly mechanics, radiation, and heat. T. 1. — Basic books, 2011.
4. *Bilz H., Kress W.* Phonon dispersion relations in insulators. T. 10. — Springer Science & Business Media, 2012.
5. *Wolfe J. P.* Imaging phonons. — 1998.
6. The principles of statistical mechanics. T. 51 / R. C. Tolman [та ін.]. — Oxford University Press Oxford, 1938.
7. *Schwabl F.* Quantum mechanics. — Springer Science & Business Media, 2013.
8. *Pearsall T. P.* Quantum photonics. — Springer, 2017.
9. *Dean P., Bacon M.* Vibrations of two-dimensional disordered lattices // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. — 1965. — T. 283, № 1392. — С. 64–82.
10. *Boyce W. E., DiPrima R. C.* Elementary differential equations. T. 6. — Wiley New York, 2012.
11. *Bharech S., Kumar R.* A review on the properties and applications of graphene // J. Mater. Sci. Mech. Eng. — 2015. — T. 2, № 2025. — С. 70–73.
12. *Wang J., Mu X., Sun M.* The thermal, electrical and thermoelectric properties of graphene nanomaterials // Nanomaterials. — 2019. — T. 9, № 2. — С. 218.
13. Fundamentals of heat and mass transfer. T. 6 / F. P. Incropera [та ін.]. — Wiley New York, 1996.
14. Ballistic to diffusive crossover of heat flow in graphene ribbons / M.-H. Bae [та ін.] // Nature communications. — 2013. — T. 4, № 1. — С. 1734.

15. Heat conduction across monolayer and few-layer graphenes / Y. K. Koh [та ін.] // Nano letters. — 2010. — Т. 10, № 11. — С. 4363—4368.
16. Cahill D. G., Goodson K., Majumdar A. Thermometry and thermal transport in micro/nanoscale solid-state devices and structures // J. Heat Transfer. — 2002. — Т. 124, № 2. — С. 223—241.
17. Two-dimensional phonon transport in supported graphene / J. H. Seol [та ін.] // Science. — 2010. — Т. 328, № 5975. — С. 213—216.
18. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene / X. Xu [та ін.] // Nature communications. — 2014. — Т. 5, № 1. — С. 3689.
19. Grigorenko A. N., Polini M., Novoselov K. Graphene plasmonics // Nature photonics. — 2012. — Т. 6, № 11. — С. 749—758.
20. Raman measurements of thermal transport in suspended monolayer graphene of variable sizes in vacuum and gaseous environments / S. Chen [та ін.] // ACS nano. — 2011. — Т. 5, № 1. — С. 321—328.
21. Heremans J., Beetz Jr C. Thermal conductivity and thermopower of vapor-grown graphite fibers // Physical Review B. — 1985. — Т. 32, № 4. — С. 1981.
22. Casimir H. Note on the conduction of heat in crystals // Physica. — 1938. — Т. 5, № 6. — С. 495—500. — ISSN 0031-8914. — DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(38\)80162-2](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(38)80162-2). — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891438801622>.
23. Maris H. J., Tamura S.-i. Heat flow in nanostructures in the Casimir regime // Physical Review B. — 2012. — Т. 85, № 5. — С. 054304.
24. Wang Z., Mingo N. Absence of Casimir regime in two-dimensional nanoribbon phonon conduction // Applied Physics Letters. — 2011. — Т. 99, № 10.
25. Perlmutter M., Siegel R. Effect of Specularly Reflecting Gray Surface on Thermal Radiation Through a Tube and From Its Heated Wall // Journal of Heat Transfer. — 1963. — Лют. — Т. 85, № 1. — С. 55—62. — ISSN 0022-1481. — DOI: 10.1115/1.3686010. — eprint: <https://asmedigitalcollection.asme.org/heattransfer/article-pdf/>

- 85/1/55/5494549/55_1.pdf. — URL: <https://doi.org/10.1115/1.3686010>.
26. *Amrit J., Nemchenko K., Vikhtinskaya T.* Effect of diffuse phonon boundary scattering on heat flow // Journal of Applied Physics. — 2021. — Лют. — Т. 129, № 8. — С. 085105. — ISSN 0021-8979. — DOI: 10.1063/5.0036935. — eprint: https://pubs.aip.org/aip/jap/article-pdf/doi/10.1063/5.0036935/15261964/085105_1_online.pdf. — URL: <https://doi.org/10.1063/5.0036935>.
 27. *Richardson C., Ehrlich M., Wagner J.* Investigation of diffuse interfaces using time-resolved acoustic spectroscopy // Journal of applied physics. — 1999. — Т. 85, № 2. — С. 861—867.
 28. *Holland M.* Analysis of lattice thermal conductivity // Physical review. — 1963. — Т. 132, № 6. — С. 2461.
 29. Analytical description of phonon heat flow with diffusive boundary scattering / J. Amrit [та ін.] // Low Temperature Physics. — 2023. — Серп. — Т. 49, № 8. — С. 961—966. — ISSN 1063-777X. — DOI: 10.1063/10.0020163. — eprint: https://pubs.aip.org/aip/ltp/article-pdf/49/8/961/18116170/961_1_10.0020163.pdf. — URL: <https://doi.org/10.1063/10.0020163>.
 30. *Polyanin P., Manzhirov A. V.* Handbook of integral equations. — Chapman, Hall/CRC, 2008.
 31. *Oligschleger C., Schön J.* Simulation of thermal conductivity and heat transport in solids // Physical Review B. — 1999. — Т. 59, № 6. — С. 4125.
 32. Intrinsic anisotropy of thermal conductance in graphene nanoribbons / Y. Xu [та ін.] // Applied Physics Letters. — 2009. — Т. 95, № 23.
 33. A molecular dynamics study on thermal conductivity of armchair graphene nanoribbon / A. I. Khan [та ін.] // 2016 IEEE Region 10 Conference (TENCON). — IEEE. 2016. — С. 2775—2778.
 34. *Zhang G., Zhang H.* Thermal conduction and rectification in few-layer graphene Y Junctions // Nanoscale. — 2011. — Т. 3, № 11. — С. 4604—4607.

35. Raman spectroscopy and imaging of graphene / Z. Ni [та ін.] // Nano Research. — 2008. — Т. 1. — С. 273—291.