

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

«Особливості перенесення тепла в наддовгих двовимірних наноструктурах»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64

Волошко М. О.

Спеціальність: 105 – «Прикладна фізика та
наноматеріали»

Освітньо-наукова програма: «Комп'ютерна
фізика»

Керівник: к. ф.-м. н., доцент Рогова С.Ю.

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
(підпис)

«_____» _____ 2024 р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Волошку Максиму Олександровичу

1. Тема роботи «Особливості перенесення тепла в наддовгих двовимірних наноструктурах», керівник роботи доцент Рогова Світлана Юріївна, затверджені наказом по університету від 23 січня 2024 року № 4201- 5/144.
2. Строк подання студентом роботи 20 травня 2024 р.
3. Перелік питань, які потрібно розглянути:
 - 1) Аналіз фізичних принципів теплопередачі.
 - 2) Аналіз сучасного обладнання для теплопередачі.
 - 3) Використання наноструктур для створення матеріалів для відведення тепла.
 - 4) Моделювання процесів перенесення тепла в двовимірних наноструктурах з різною ступенем дзеркальності границь?

5) Проведення фізичного аналізу здобутих результатів і постановка нових числових експериментів.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Огляд основних принципів теплопередачі та аналіз актуальності питання
2	Аналіз особливостей та способи моделювання перенесення тепла в наноструктурах
3	Аналіз схем перенесення тепла та деталі моделювання
4	Виявлення залежностей теплопередачі від розсіювання на границях в наддовгих вузьких провідниках
5	Аналіз знайдених залежностей, обговорення фізичних причини аномальної поведінки
6	Формулювання висновків дипломної роботи та огляд подальших перспектив

5. Дата видачі завдання 23 лютого 2024 р.

Студент _____ Максим ВОЛОШКО

Керівник роботи _____ Світлана РОГОВА

ЗМІСТ

ВСТУП	7
1. ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА.....	11
1.1 Огляд основних принципів теплопередачі та поняття теплопровідності...	11
1.2 Сфери, в яких теплопередача відіграє ключову роль.....	13
1.3 Сучасні проблеми пов'язані з теплопередачею.....	14
1.4 Перенесення тепла в наноматеріалах.....	15
2. ОСОБЛИВОСТІ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА В НАНОСТРУКТУРАХ.....	17
1.5 Ефективна балістично-дифузійна теплопровідність в наноструктурах з внутрішнім джерелом тепла.....	17
1.6 Аналіз схем та деталі моделювання.....	19
1.7 Метод Монте-Карло для моделювання фононного переносу тепла.....	21
2.4 Ефективна теплопровідність наноплівки із внутрішнім джерелом тепла...	23
2. ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕПЛОПЕРЕДАЧІ ВІД РОЗСІЮВАННЯ НА ГРАНИЦЯХ В ДУЖЕ ДОВГИХ ВУЗЬКИХ ПРОВІДНИКАХ	32
2.1 Постановка задачі.....	32
2.2 Модель системи.....	33
2.3 Обговорення результатів.....	35
4.ВИСНОВКИ РОБОТИ.....	38
4.1 Отримані результати дослідження.....	38
4.2 Можливості використання наноструктур у тепловідведенні.....	39
4.3 Перспективи подальших досліджень.....	40
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	42

РЕФЕРАТ

Волошко Максим Олександрович. «Особливості перенесення тепла в наддовгих двовимірних наноструктурах». Кваліфікаційна робота магістра прикладної фізики та наноматеріалів. – ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2024. – 44 с.

Метою роботи є дослідження особливостей перенесення тепла в наддовгих двовимірних наноструктурах, можливість використання наноматеріалів в створенні обладнання для передачі теплової енергії.

Основними завданнями роботи є: аналіз принципів теплопередачі, особливості та моделювання перенесення тепла в наноструктурах, можливість використання наноструктур для створення тепловідвідних матеріалів, як можна моделювати процеси перенесення тепла в наддовгих двовимірних наноструктурах для кращого розуміння їхньої фізики.

Дипломна робота містить: 44 сторінки, 7 рисунків, 2 таблиці, 41 джерело.

Ключові слова: НАДДОВГІ ДВОВИМІРНІ НАНОСТРУКТУРИ, ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА, ТЕПЛОПЕРЕДАЧА, БАЛІСТИЧНО-ДИФУЗІЙНА ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, НАНОПЛІВКИ.

ABSTRACT

Voloshko Maksym Oleksandrovysh. "Features of Heat Transfer in Long Two-Dimensional Nanostructures." Master's Thesis in Applied Physics and Nanomaterials. – V. N. Karazin Kharkiv National University, 2024. – 46 pages.

The aim of the work is to study the features of heat transfer in long two-dimensional nanostructures and the possibility of using nanomaterials in the creation of equipment for thermal energy transfer. The main tasks of the work include: analysis of heat transfer principles, features and modelling of heat transfer in nanostructures, the possibility of using nanostructures to create heat-dissipating materials, and how to model heat transfer processes in long two-dimensional nanostructures for a better understanding of their physics.

The thesis includes: 46 pages, 7 figures, 2 tables, 41 sources.

Keywords: VERY LONG TWO-DIMENSIONAL NANOSTRUCTURES, HEAT TRANSFER, BALLISTIC-DIFFUSIVE THERMAL CONDUCTIVITY, HEAT TRANSFER, NANOFILMS.

ВСТУП

Актуальність Люди завжди розуміли, що щось тече від гарячих предметів до холодних. Ми називаємо цей потік теплом. У вісімнадцятому та на початку дев'ятнадцятого століть вчені вважали, що всі тіла містять невидиму рідину, яку вони назвали калорією. Калорійності приписували різноманітні властивості, деякі з яких виявилися несумісними з природою (наприклад, вона мала вагу і її не можна було ні створити, ні знищити). Але найважливішою особливістю було те, що вона перетікала від гарячих тіл до холодних. Це був дуже корисний спосіб думати про тепло. Пізніше ми пояснимо потік тепла в термінах, більш задовільних для сучасного вуха; однак уявити, що калорійність тече від гарячого тіла до холодного, рідко буде неправильним.

Потік тепла є всепроникним. Він певною мірою активний у всьому. Тепло постійно тече від вашої крові до повітря навколо вас. Нагріте повітря відривається від вашого тіла, щоб зігріти кімнату, у якій ви перебуваєте. Якщо ви виходите у кімнаті продовжуватиметься якийсь невеликий виштовхувальний (або конвективний) рух повітря, оскільки стіни ніколи не можуть бути абсолютно ізотермічними. Такі процеси відбуваються в усіх рослинах і тваринах, а також у повітрі навколо нас. Вони відбуваються по всій землі, який є гарячим у своєму ядрі та охолодженим навколо своєї поверхні. Єдиною можливою територією, вільною від теплового потоку, є інша область, повністю ізольована від будь-якої іншої.

Вона була б «мертвою» у повному розумінні цього слова — позбавленою будь-яких процесів. Загальною рушійною силою цих процесів теплового потоку є охолодження (або вирівнювання) теплових градієнтів у нашому Всесвіті. Теплові потоки, які є результатом охолодження Сонця, є основними процесами, які ми відчуваємо природним шляхом. Кондуктивне охолодження центру Землі та Радіаційне охолодження інших зірок є другорядними процесами в нашому житті. Форми життя на нашій планеті неодмінно еволюціонували відповідно до величини цих енергетичних потоків. Але в той

час як «природна людина» знаходиться в рівновазі з цими тепловими потоками, «технічна людина» використовувала свій розум, свою спину і свою волю, щоб використовувати і контролювати енергетичні потоки, які є набагато інтенсивнішими, ніж ті, які ми відчуваємо природньо. Щоб підкреслити це, пропонуємо провести експеримент.

Генеруйте якомога більше енергії таким чином, щоб ви могли виміряти свою власну продуктивність. Ви можете підняти вагу або пробігти по сходах, дивлячись на секундомір. Виразіть результат у ватах (Вт). Зазвичай вони мають бути меншими за 1 кВт або навіть 1 кінську силу (746 Вт). Як би дивно це не було.

Таким чином, коли ми робимо таку дрібницю, як вмикання лампочки на 150 Вт, ми маніпулюємо кількістю енергії, значно більшою, ніж людина могла б виробити, докладаючи тривалих зусиль. Енергія, яку споживає духовка, тостер або водонагрівач, на порядок перевищує наші можливості. Енергія, споживана автомобілем, легко може бути на три порядки більшою. Якби всі люди в Сполучених Штатах працювали безперервно, як раби на галерах, вони ледь могли б дорівнювати потужності електростанції навіть одного міста.

Наш ненажерливий апетит до енергії неухильно підвищував інтенсивність фактичних процесів теплообміну, поки вони не стали набагато більшими, ніж ті, які зазвичай пов'язані з формами життя на землі. До середини тринадцятого століття енергію, яку ми використовуємо, отримували опосередковано від сонця за допомогою порівняно м'яких процесів — енергії тварин, енергії вітру та води, а також спалювання деревини. Потім зростання населення та вирубка лісів змусили англійців використовувати вугілля. До кінця сімнадцятого століття Англія майже повністю перейшла на вугілля замість деревини. На рубежі вісімнадцятого століття були розроблені перші комерційні парові двигуни, що створило основу для надзвичайного збільшення споживання вугілля. Європа і Америка слідувала за Англією в цих подіях. Розвиток викопних джерел енергії був трохи схожий на опис Жуль Верна у книзі «Навколо світу за вісімдесят днів», де, щоб виграти перегони,

команда спалює внутрішню частину корабля, щоб привести в дію паровий двигун. Спалювання невідновлюваних викопних джерел енергії (і, нещодавно, розщеплення урану) призвело до надзвичайно інтенсивного виділення енергії в енергетичному обладнанні. Потужність ядерного реактора для передачі енергії складає близько мільйона ват на квадратний метр.

Складна система процесів передачі тепла та роботи незмінно потрібна, щоб повернути ці концентрації енергії до людських пропорцій. Ми повинні розуміти та контролювати процеси, які поділяють і розсіюють інтенсивні теплові потоки до рівня, на якому ми можемо взаємодіяти з ними. Щоб побачити, як це працює, розглянемо конкретну ситуацію. Припустимо, що ми живемо в місті, де вугілля переробляється на паливний газ і кокс. Раніше такі джерела живлення були звичайними, і вони можуть повернутися, якщо поставки природного газу колись скоротяться. Нехай ми перелічимо кілька проблем теплообміну, які необхідно вирішити, перш ніж ми зможемо випити склянку холодного чаю.

-Різноманітність високоінтенсивних процесів теплопередачі пов'язана з горінням і хімічними реакціями в самому газифікаторі.

-Газ проходить різні процеси очищення та подачі по трубах, щоб потрапити до наших печей. Процеси теплопередачі, які беруть участь у цих етапах, як правило, менш інтенсивні.

-Газ спалюється в плиті. Тепло передається від полум'я до дна чайника. Хоча цей процес невеликий, він інтенсивний, оскільки кип'ятіння є дуже ефективним способом видалення тепла.

-Кокс спалюється в паровій електростанції. Теплопередача від камери згоряння до котла та від стінки котла до води всередині дуже інтенсивна.

-Пара проходить через турбіну, де вона бере участь у багатьох процесах теплообміну, включаючи деяку конденсацію на останніх етапах. Потім відпрацьована пара конденсується в будь-якому з різних пристроїв теплопередачі.

-Охолодження має бути забезпечене на кожному етапі системи електропостачання: обмотки та підшипники генератора, трансформатори, вимикачі, лінії електропередачі та електропроводка в наших будинках.

-Кубики льоду для нашого чаю виготовляються в електричному холодильнику. Він включає три основні процеси теплообміну та кілька менших. Основні з них – конденсація холодоагенту при кімнатній температурі для відведення тепла, поглинання тепла зсередини холодильника шляхом випаровування холодоагенту та балансує витоку тепла з приміщення всередину.

-Давайте швидко вип'ємо холодного чаю, тому що передача тепла від кімнати до води та від води до льоду спершу розбавить, а потім зігріє наш чай, якщо ми затримаємося.

Основа на технології енергетичне суспільство буквально кишить проблемами теплопередачі. Наша мета - вивчити принципи теплопередачі, щоб ми могли вирішити ці проблеми та розробити необхідне обладнання для передачі теплової енергії від одного речовини до іншої. У широкому розумінні всі ці проблеми зводяться до того, щоб зібрати і зосередити величезні кількості енергії для використання людьми, а потім розподілити і інтегрувати цю енергію з людьми таким чином, щоб вони могли використовувати її на своєму власному скромному рівні. Ми починаємо наше дослідження, згадуючи, як теплопередача розглядалася у вивченні термодинаміки, і бачимо, чому термодинаміка не є абсолютною, для вирішення проблем теплопередачі.

1. ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА

1.1.Огляд основних принципів теплопередачі та теплопровідності

Теплопередача є важливим процесом у природі та техніці, який відбувається внаслідок руху теплової енергії від областей вищої температури до областей нижчої температури. Дослідження теплопередачі має велике значення для розуміння теплових процесів в різних системах, від електроніки до природних явищ. Основні принципи теплопередачі включають конвекцію, кондукцію та випромінювання. Конвекція - це процес теплопередачі через переміщення рідини або газу, коли гарячі області рідини або газу піднімаються вгору, замінюючи холодніші області. Для її опису можна використовувати рівняння Нав'є-Стокса для рідин або газів, яке враховує теплові потоки разом з потоками речовини. Цей процес може виникати природно або за участю зовнішніх сил, таких як вентилятори чи насоси. Кондукція відбувається через дотик частинок тіла і не вимагає переміщення тіл. Чим краще провідність матеріалу, тим ефективніше відбувається кондукція. Наприклад, метали мають високу провідність тепла. Для кондукції використовується закон Фур'є, який описує залежність теплопровідності матеріалу від температурного градієнту. Випромінювання - це передача тепла від тіл з вищою температурою до тіл з нижчою температурою через електромагнітні хвилі. Випромінювання може відбуватися у вакуумі та не вимагає прямого контакту між тілами. Описується за допомогою законів електромагнітної теорії, таких як закон Стефана-Больцмана, який визначає потік енергії через поверхню тіла відносно його температури.

Звичайно, у більш складних системах теплопередачі можуть співіснувати декілька видів передачі тепла одночасно. Наприклад, у системі опалення, тепло може передаватися від радіатора до повітря за допомогою конвекції, а також через стіни за допомогою кондукції. Розуміння цих принципів є важливим для розвитку ефективних систем теплового управління та тепловідведення.

А тепер розглянемо поняття теплопровідності, яке грає ключову роль у вивченні питання теплопередачі. Це фізична величина, яка характеризує здатність речовини проводити тепло. У процесі теплопровідності теплова енергія передається від більш нагрітого кінця тіла до менш нагрітого через взаємодію між атомами або молекулами речовини. Ця взаємодія передбачається законами теплопровідності, які описують, як швидко тепло переноситься через матеріал.

У кристалічних тілах, таких як метали, теплопровідність пояснюється рухом вільних електронів та фононів. Вільні електрони переносять тепло швидше, ніж фонони, тому метали мають високу теплопровідність. У аморфних тілах або ж рідинах теплопровідність відбувається шляхом передачі енергії від одних молекул до інших. Теплопровідність залежить від багатьох факторів, включаючи температуру, структуру та склад матеріалу. Зазвичай теплопровідність зростає з температурою, оскільки збільшується рух атомів або молекул. Також, кристалічні матеріали мають вищу теплопровідність, ніж аморфні або полікристалічні матеріали.

У техніці теплопровідність важлива для розрахунків теплообміну, дизайну теплообмінних пристроїв та розвитку матеріалів з високою або низькою теплопровідністю для різних застосувань. Вона є одним із основних параметрів, що впливають на швидкість і ефективність теплопередачі в системах теплообміну. Розуміння теплопровідності дозволяє інженерам та науковцям розробляти більш ефективні теплові системи, матеріали та технології. Також, допомагає у вивченні глобальних кліматичних змін, теплопровідність грає важливу роль у передачі тепла в атмосфері та океані. Дослідження теплопровідності дозволяє краще розуміти та передбачати теплові процеси, що стає особливо важливим у сучасному технологічному світі, де ефективне управління теплом відіграє критичну роль в багатьох сферах людської діяльності.

1.2. Сфери, в яких теплопередача відіграє ключову роль

Ефективне управління теплом важливе в багатьох аспектах нашого життя та різних галузях діяльності. Воно допомагає забезпечити комфортні умови проживання та роботи, знижує витрати енергії, сприяє підвищенню ефективності процесів та запобігає пошкодженням обладнання та пристроїв.

Ефективне управління теплом є критичним у промисловості для запобігання перегріву машин та обладнання. Використання теплообмінників та систем охолодження допомагає зберегти оптимальну температуру пристроїв, знизити витрати енергії та підтримати їхню ефективність. У сфері електроніки ефективне відведення тепла від електронних компонентів є критичним для запобігання їх перегріву та збереження їхньої функціональності. У будівництві важливо мати ефективну теплоізоляцію, щоб зберігати тепло в приміщеннях в холодну погоду та запобігати перегріву влітку. Це допомагає знизити витрати на опалення та кондиціонування повітря. У автомобільній промисловості ефективне відведення тепла від двигунів та інших складових допомагає запобігти їх перегріву. У виробництві електроенергії важливо ефективно відводити тепло від електрогенеруючих установок, щоб забезпечити їхню надійну та ефективну роботу. Також, у медицині ефективне управління теплом допомагає забезпечити комфортні умови для пацієнтів та зберегти оптимальні умови для діагностики та лікування. У харчовій промисловості ефективне управління теплом важливе для забезпечення безпечного зберігання та обробки продуктів. В усіх цих сферах ефективне управління теплом допомагає підтримувати оптимальні умови для роботи та життя, знижує витрати енергії та допомагає запобігти негативним наслідкам перегріву або охолодження.

Як бачимо, питання теплопередачі є критичним, майже, для всіх сфер нашого суспільства, що гарно відображає важливість його вивчення. Далі розглянемо сучасні проблеми, які пов'язані з теплопередачею.

1.3 Сучасні проблеми пов'язані з теплопередачею

Сучасні проблеми, пов'язані з теплопередачею, стають все більш актуальними через зростання вимог до енергоефективності та стійкості технологій. Однією з таких проблем є використання енергії в промисловості та будівництві, де значна частина тепла втрачається через неефективні теплообмінні процеси та недостатню теплоізоляцію. Це веде до великих енерговитрат і забруднення навколишнього середовища.

Ще однією проблемою є перегрів електроніки через збільшення її потужності та складності. Збільшення теплового навантаження призводить до збільшення теплового випромінювання, яке може впливати на ефективність та тривалість роботи електронних пристроїв.

Ефективне відведення тепла стає ключовим аспектом у розробці та використанні сучасної електроніки, адже людство розвиває цю сферу в геометричній прогресії. Чого тільки варті квантові комп'ютери, ці комп'ютери працюють при дуже низьких температурах, близьких до абсолютного нуля, необхідно забезпечити стабільні умови для їхньої правильної роботи. Основні проблеми, пов'язані з теплопередачею в квантових комп'ютерах, включають теплову стабільність, ефективне відведення тепла, високу теплопровідність матеріалів, мінімізацію втрат тепла та дисипацію енергії. Усі ці аспекти вимагають ретельного вивчення та розробки нових технологій для ефективного управління теплопередачею в квантових комп'ютерах, щоб забезпечити їхню стабільну роботу.

Крім того, питання теплопередачі в контексті зміни клімату стає все більш актуальним і важливим для розуміння та прогнозування наслідків глобального потепління. Однією з ключових проблем є збільшення середньорічних температур, що може вплинути на тепловий баланс Землі. Зміни в температурному режимі можуть призвести до зсувів у розподілі тепла між атмосферою, океаном та сушею, що може викликати екстремальні погодні умови та кліматичні події. Підвищення температур може також вплинути на теплопередачу в океані, що може призвести до змін у масштабах океанських

течій та теплообміну між різними регіонами. Це може мати вплив на розподіл вологи та тепла на Землі, що, в свою чергу, може вплинути на кліматичні умови у різних частинах світу. Крім того, зміни в ареалі рослинності та покриві снігу можуть також вплинути на теплопередачу через зміни в альбедо поверхні Землі. Зменшення площі льодовиків та снігового покриву може спричинити збільшення поглинання сонячної радіації та, відповідно, підвищення температури поверхні Землі. Таким чином, питання теплопередачі в контексті зміни клімату важливо вивчати для розуміння механізмів впливу глобального потепління на кліматичні процеси та для розробки стратегій адаптації до змін у кліматі

Отже, проблеми, пов'язані з теплопередачею, стають все більш актуальними і вимагають комплексного підходу до вирішення, включаючи вдосконалення технологій теплообміну, розвиток енергоефективних рішень та впровадження нових матеріалів з високою теплопровідністю та ізоляцією.

1.4 Перенесення тепла в наноматеріалах

Завдяки дослідженням та розслідуванням, які відбувалися протягом останніх кількох століть, знання людини про макроскопічні та мікроскопічні аспекти природи та фізичного світу набули значний розвиток. Нанотехнологія вважається багатонаціональною галуззю, спрямованою на підготовку та налаштування матеріалів на атомному або молекулярному рівні. Це складна галузь досліджень та розвитку, яка передбачає виготовлення широкого спектру матеріалів з однією вимірювальною менше 100 нанометрів (нм). Дослідження та розвиток в галузі нанотехнологій спрямовані на докладне розуміння та інновації у розробці матеріалів, пристроїв та систем, демонстрацію та використання нових властивостей. У 1974 році Танігучі початково визначив нанотехнологію як область високоточних технологій продукції з точністю, яка може досягати 1 нм. Найбільш прийнятне визначення нанотехнології вказується як наука та технологія на наномасштабі як дослідження та розвиток технологій на атомному, молекулярному або

макромолекулярному рівнях на довжині 1-100 нм. Дослідження наноматеріалів почалося на початку XXI століття для використання в промисловості та комерційних цілях. Наноматеріали розглядаються як основа нанотехнології, яка вважається хімічними речовинами або матеріалами. Важливість наноматеріалів була зрозуміла, коли вчені виявили, що розмір впливає на механічні, хімічні, електричні та оптичні властивості. Таким чином, наноматеріали привертають значний інтерес через їхні виняткові властивості. Передача тепла є значним параметром в інженерних застосуваннях та промислових процесах. Теплообмінники, що використовуються в теплових системах, були великим викликом для дослідників теплопередачі протягом багатьох років. Покращення ефективності пристроїв теплообміну відбувається, коли велика кількість тепла може бути передана через невелику різницю температур. Робоча рідина в теплових системах, таких як автомобільні радіатори або охолодження електронних пристроїв, були традиційними теплоносіями, такими як вода, етиленгліколь та мастило, і т. Д. Кілька дослідників вивчали покращення ефективності теплоносіїв. Нові можливості покращення швидкості теплопередачі за допомогою нанорідин порівняно з традиційними рідинами, роблячи їх теплоносіями наступного покоління, оскільки вони володіють винятковою ефективністю теплопередачі та теплопровідністю.

2. ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА В НАНОСТРУКТУРАХ

2.1. Ефективна балістично-дифузійна теплопровідність

Широке застосування напівпровідникових наноструктур у електроніці та фотоніці вимагає подальшого розуміння теплопередачі на наномасштабі[1]. Фонони переважають у теплопередачі у напівпровідниках[2] . Для наноструктур, характерні розміри яких порівняні з середньою довжиною вільного пробігу фононів (MFP), завдяки балістичному транспортуванню та розсіюванню фононів на межі, теплопровідність відхиляється від закону Фур'є, що відповідає межі повністю дифузного транспортування. Присутність як балістичного, так і дифузного транспортування призводить до балістично-дифузійної теплопровідності, яка зазвичай характеризується фононним рівнянням переносу Больцмана (BTE) з апроксимацією часу релаксації [3]

$$\vec{v}_g \cdot \nabla f = \frac{f_0 - f}{\tau} + \dot{S}_\Omega, \quad (1)$$

де v_g - групова швидкість, f – функція розподілу фононів, f_0 - рівноважна функція розподілу, τ - час релаксації, S_Ω - джерело фононів на тілесний кут.

У режимі балістично-дифузійної теплопровідності деякі фонони можуть прямувати від однієї межі до іншої без внутрішніх подій розсіювання, і вплив розсіювання фононів на межі стає помітним. Основні показники балістично-дифузійної теплопровідності включають розмірний ефект, залежність від геометрії та анізотропію ефективної теплопровідності[4-6]. Дослідження ефективної теплопровідності наноструктур були проведені як теоретично[7-15], так і експериментально[16-21]. Встановлено, що в балістично-дифузійному режимі ефективна теплопровідність, яка значно знижується в порівнянні з масивним матеріалом, зростає зі збільшенням характерної довжини і змінюється в залежності від напрямку теплового потоку. У моделюванні дослідження[7-8], як правило, передбачається, що наноструктура контактує з двома радіаторами з різними температурами, і різниця температур

викликає тепловий потік. Потім за допомогою закону Фур'є розраховується ефективна теплопровідність. На основі викладеної вище схеми різниці температур (ТД), виведено теоретичні моделі ефективної теплопровідності від фононного БТЕ[7-9,22] . Крім того, схема ТД широко використовується в моделюванні[11-12] та експериментах[4,16,17]. Насправді схема ТД – не єдиний вибір для вимірювання теплопровідності. Схема внутрішнього джерела тепла (Internal Heat Source, IHS) також використовувалася в експериментах[18-21]. Внутрішнє джерело тепла вводиться в наноструктури, і вимірюється отримане підвищення температури; потім ефективна теплопровідність отримується порівнянням результатів вимірювання з аналітичним розв'язком рівняння дифузійної теплопровідності. Liu та Asheghi [18] виміряли поперечну теплопровідність шарів кремнію, вводячи стале однорідне внутрішнє джерело тепла (Joule heating), тоді як теоретична модель, отримана зі схеми різниці температур (TD scheme), використовувалася для аналізу експериментальних даних. У експериментах Johnson [20] вводили транзитне внутрішнє джерело тепла за допомогою дифракції лазерного променя для вимірювання теплопровідності вільностоячих мембран кремнію. Крім того, схема IHS також була корисним інструментом для вимірювання теплопровідності вуглецевих нанотрубок[1,21].

Хоча обидві схеми, TD та IHS, широко використовуються для вимірювання теплопровідності, все ще є неоднозначність, чи є ефективна теплопровідність, отримана за допомогою схеми TD, такою самою, як та, яка була отримана за допомогою схеми IHS, особливо для балістично-дифузійної теплопровідності. Li та Cao[13,14] вивчали ефективну теплопровідність наноструктур з внутрішнім джерелом тепла за допомогою нелокальних молекулярно-динамічних симуляцій, і виявили, що ефективна теплопровідність за схемою IHS була значно нижче, ніж за схемою TD. Фонони виходять з теплових резервуарів на межах в схемі TD, тоді як у схемі IHS фонони виникають усередині середовища, і різні місця походження фононів можуть призводити до різних ефектів, пов'язаних з обмеженням на

межах на тепловий транспорт фононів. Фонони, які виникають усередині середовища, зазнають більше розсіювань на межах, ніж ті, що виходять з теплових резервуарів на межах, і середня довжина вільного пробігу (MFP) за схемою IHS може бути більш обмеженою межами, ніж за схемою TD[13]. Згідно з кінетичною теорією[2], ефективна теплопровідність пропорційна обмеженим межами довжині вільного пробігу. Тому ефективна теплопровідність за схемою IHS значно нижча, ніж за схемою TD. Крім того, у електронних пристроях, де існує самоопалення, точне передбачення ефективної теплопровідності наноструктур з внутрішнім джерелом тепла стає вельми важливим. Хоча теплопередачу в електронних пристроях широко вивчали[23,24], теоретична модель для ефективної теплопровідності наноструктур з внутрішнім джерелом тепла все ще відсутня. Тому поведінка ефективної теплопровідності, залежна від розміру, у наноструктурах з внутрішнім джерелом тепла все ще погано зрозуміла, і є велике бажання мати прогностичну модель. У цій роботі досліджується ефективна теплопровідність наноструктур, а саме наддовгих двовимірних наноструктур(наноплівки). Застосовується метод Монте-Карло (МС) для моделювання фононної теплопередачі. Виявлено, що ефективна теплопровідність за схемою IHS значно нижча, ніж за схемою TD. Прогностичні моделі для ефективної теплопровідності наноструктур з внутрішнім джерелом тепла отримані на основі фононного ВТЕ і правила Маттісена. Крім того, застосовується дифузійне рівняння теплопровідності з ефективною теплопровідністю для характеристики розподілу температур в наноструктурах з внутрішнім джерелом тепла.

2.2. Аналіз схем та деталі моделювання

Схема внутрішнього джерела тепла показана на рис. 1(a.1)–(b.1). В наноструктури вводиться стале однорідне внутрішнє джерело тепла \dot{Q} , що контактує з двома тепловими резервуарами з посиленням на температуру T_0 . Поперечні межі є адіабатичними. Тому, у дифузійному режимі,

теплопровідність може бути розглянута як одновимірна, і профіль температури виводиться з закону Фур'є.

$$T(x) = \frac{\dot{S}}{2k} (L_x - x)x + T_0, \quad (2)$$

де L_x - відстань між двома радіаторами, а k – це теплопровідність. Для плоских наноплівки, температура $T(x)$ усередині середньо арифметично визначається в поперечному перерізі. Ефективна теплопровідність потім визначається з середнього збільшення температури ΔT наноструктур.

$$k_l = \frac{L_x^2 \dot{S}}{12 \Delta \bar{T}}, \quad (3)$$

разом з

$$\Delta \bar{T} = \frac{1}{L_x} \int_{L_x} T dx - T_0. \quad (4)$$

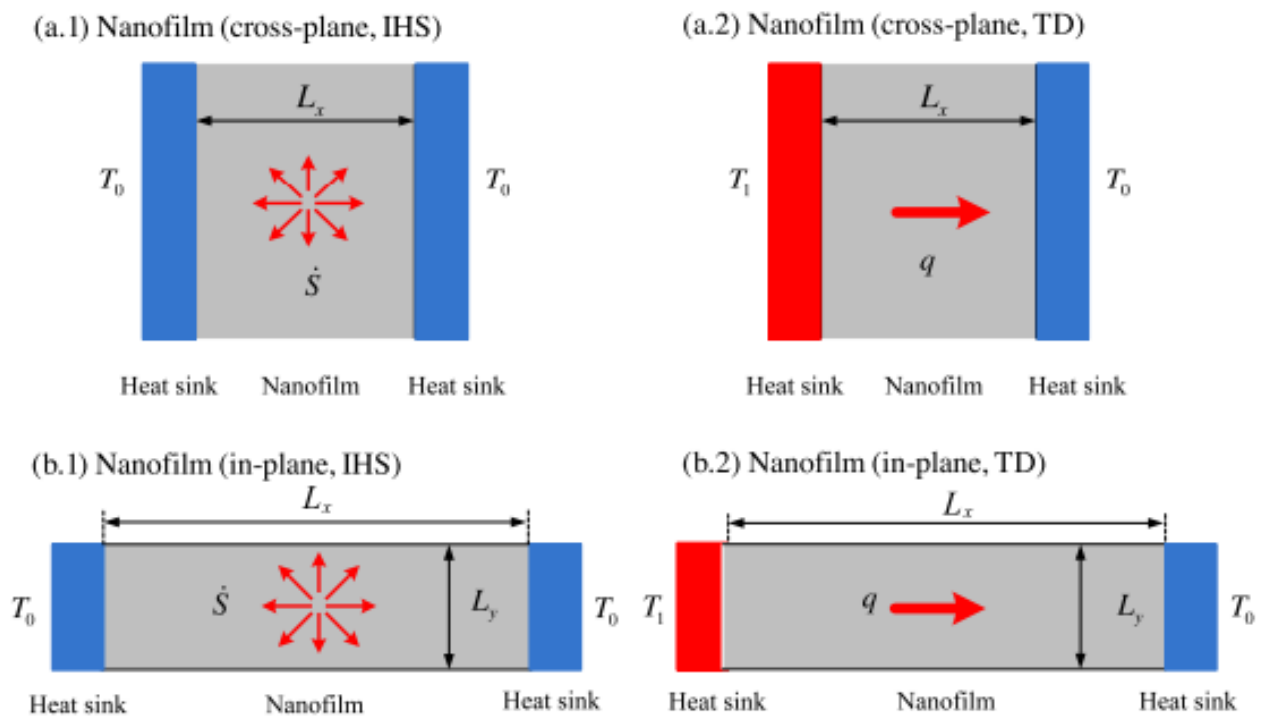


Рис.1. Схеми балістично-дифузійної теплопровідності в наноструктурах: (a.1) наноплівки (поперечний переріз, IHS); (a.2) наноплівки (поперечний переріз, TD); (b.1) наноплівки (продольний переріз, IHS); (b.2) наноплівки (продольний переріз, TD);

У схемі TD, як показано на рис. 1(a.2)–(b.2), кожна наноструктура знаходиться в контакті з двома тепловими резервуарами різних температур (T_1

і T_0), і різниця температур становить $\Delta T = T_1 - T_0$, що призводить до теплового потоку q у напрямку x . Використовуючи закон Фур'є, розраховується ефективна теплопровідність.

$$k_T = \frac{qL_x}{\Delta T}. \quad (5)$$

Тепловий потік q усередині середньо арифметично визначається в поперечному перерізі.

Для моделювання фононної теплопередачі в наноструктурах кремнію використовується метод Монте-Карло. Для фононних властивостей кремнію використовується апроксимація середніх властивостей, яка передбачає, що властивості фононів не залежать від частоти. Тому фонони рухаються з однією швидкістю групи, а частота розсіювання описується середнім вільним пробігом фононів. Середній вільний пробіг фононів розраховується за формулою

2.3 Метод Монте-Карло для моделювання фононного переносу тепла

Для моделювання фононної теплопередачі в наноструктурах кремнію використовується метод Монте-Карло[25-27]. Для фононних властивостей кремнію використовується апроксимація середніх властивостей, яка передбачає, що властивості фононів не залежать від частоти. Тому фонони рухаються з однією швидкістю групи, а частота розсіювання описується середнім вільним пробігом фононів. Середній вільний пробіг фононів розраховується за формулою

$$l = \frac{3k_{bulk}}{(\rho c_v v_g)} \quad (6)$$

де k_{bulk} - теплопровідність масиву, c_v - об'ємна специфічна теплоємність, ρ - густина, а v_g - середня швидкість групи. Для кремнію при кімнатній температурі k_{bulk} складає 150 Вт/(м К), c_v - 700 Дж/(кг К), ρ - 2330 кг/м³, і v_g -

6400 м/с. Отже, середній вільний пробіг фононів складає близько 43,7 нм. Щодо значення середнього вільного пробігу фононів кремнію при кімнатній температурі все ще існують дискусії. На основі більш детальної моделі дисперсії і розглядаючи лише акустичні фонони, які несуть більшу частину тепла, середній вільний пробіг фононів кремнію коливається від 200 нм до 300 нм[28,29]. Однак, коли вибирається більший вільний пробіг на основі моделі дисперсії, відповідні теплоємність та середня швидкість групи також повинні бути вибрані. Тут вибирається вільний пробіг у 43,7 нм разом із відповідною теплоємністю та середньою швидкістю групи. Насправді, оскільки всі величини у Монте-Карло симуляціях та моделях є безрозмірними, вибір вільного пробігу не впливає на порівняння між ними.

Метод Монте-Карло є добре розвиненим інструментом для симуляцій фононної теплопередачі. Він моделює процеси фононного транспорту за допомогою випадкових вибірок чисел, що еквівалентно безпосередньому розв'язанню фононного ВТЕ[25-27]. Границі у напрямку x розглядаються як фононні тіла чорного тіла, тобто фонони повністю поглинаються ними, тоді як бічні границі є адіабатичними, і розсіювання фононів на межах вважається повністю дифузійним. Щодо теплопровідності у поперечному напрямку в наноплівках, обмеження у напрямку y не враховується. Навпаки, для теплопровідності у площині наноплівок, оскільки товщина у напрямку x набагато більша за товщину у напрямку y , тобто $L_x \gg L_y$, теплопровідність фононів головним чином впливає на обмеження у напрямку y . Подібно до теплопровідності у площині наноплівок, лише бічне обмеження враховується для довгих нанопровідників ($L \gg D$), тоді як для коротких нанопровідників

На границі ($L \sim D$) слід враховувати як бічні, так і осьові обмеження. Для схеми TD фонони з визначеною температурою виходять з теплових резервуарів на границях у напрямку x . Навпаки, для схеми IHS внутрішнє джерело тепла реалізовано шляхом встановлення джерела фононів всередині наноструктур, тобто фонони з визначеною енергією виникають всередині наноструктур. Потім фонони сліdkують у домені, поки вони не виходять через

границі у напрямку x , а внутрішні розсіювальні процеси, такі як фонон-домішки та фонон-фононні розсіювання, розглядаються за наближенням часу релаксації[26]. Кількість фононних пакетів для відстеження дорівнює 10^8 , а одиниця контрольного обсягу $\Delta x = 0.1L_x$.

2.3. Ефективна теплопровідність наноплівки із внутрішнім джерелом

Розглянемо поперечну ефективну теплопровідність наноплівки. Одновимірне фононне рівняння переносу може бути застосоване для характеристики поперечного фононного транспорту в наноплівках з внутрішнім джерелом тепла.

$$v_{gx} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_0 - f}{\tau} + \dot{S}_\Omega. \quad (7)$$

Тут $v_{gx} = v_g \cos(\theta)$, де θ - кут між напрямком фононного руху та напрямком x . Місцева температура та тепловий потік можна отримати інтегруванням функції розподілу.

$$G(x) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \int \hbar\omega \text{DOS}(\omega) d\omega f, \quad (8)$$

$$q(x) = 2\pi \int_{-1}^1 \mu d\mu \int v_g \hbar\omega \text{DOS}(\omega) d\omega f, \quad (9)$$

де ω - кутова частота фононів, \hbar - константа Дірака, а $\text{DOS}(\omega)$ - густина станів. Функція $G(x)$ прямо пов'язана з локальною температурою $T(x)$,

$$\begin{aligned} G(x) &= 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \int \hbar\omega \text{DOS}(\omega) d\omega f \\ &\approx T(x) \left[2\pi \int_{-1}^1 d\mu \int \hbar\omega \text{DOS}(\omega) d\omega \frac{\partial f}{\partial T} \right] \\ &\approx T(x) \left[2\pi \int_{-1}^1 d\mu \int \hbar\omega \text{DOS}(\omega) d\omega \frac{\partial f_0}{\partial T} d\omega \right] = c_v \rho T(x), \end{aligned} \quad (10)$$

де c_v - об'ємна теплоємність, а ρ - густина маси. Коли система порівнянна з середнім вільним пробігом, припущення про локальну термодинамічну рівновагу не може бути досягнуто, і температура втрачає своє звичайне значення, як представлення теплової рівноваги[28]. У цьому випадку температура, визначена в рівнянні (9), є представленням середньої енергії всіх фононів навколо локальної точки.

Функцію розподілу можна розділити на дві частини, $f = f_s + f_d$, де f_s - це частина, яка зумовлена джерелом, що характеризується двокрапковим наближенням[30], а f_d - дифузійна частина, яка характеризується диференціальним наближенням[31]. Основне рівняння для частини, яка зумовлена джерелом, виражається таким чином:

$$v_{gx} \frac{\partial f_s}{\partial x} = -\frac{f_s}{\tau} + \dot{S}_\Omega. \quad (11)$$

Для розв'язання рівняння(11) використовується доточкове наближення.

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}l \frac{\partial f_s^-}{\partial x} &= \tau \dot{S}_\Omega - f_s^-, \quad -1 < \mu < 0; \\ \frac{1}{2}l \frac{\partial f_s^+}{\partial x} &= \tau \dot{S}_\Omega - f_s^+, \quad 0 < \mu < +1; \end{aligned} \quad (12)$$

де $\mu = \cos \theta$, l - середній вільний пробіг та $l = v_g \tau$. З відповідними граничними умовами: $f_s^+(0) = 0$ і $f_s^-(L_x) = 0$, частина, зумовлена джерелом, може бути виражена як,

$$\begin{aligned} f_s^+(x) &= \tau \dot{S}_\Omega [1 - \exp(-2\frac{x}{l})], \\ f_s^-(x) &= \tau \dot{S}_\Omega [1 - \exp(-2\frac{L_x - x}{l})]. \end{aligned} \quad (13)$$

Таким чином, рівняння (8) і (9) можна записати у вигляді,

$$G_s = \frac{\dot{S}}{2} \left[2 - \exp\left(-2\frac{x}{l}\right) - \exp\left(-2\frac{L_x - x}{l}\right) \right], \quad (14)$$

$$q_s = \frac{\dot{S}}{4} \left[\exp\left(-2\frac{L_x - x}{l}\right) - \exp\left(-2\frac{x}{l}\right) \right], \quad (15)$$

в якому $\check{S} = 4\pi \int \hbar\omega\tau\check{S}_\Omega D_\omega d\omega$.

Що стосується дифузійної частини, основне рівняння можна записати як,

$$v_g\mu \frac{\partial f_d}{\partial x} = \frac{-f_d + f_0}{\tau}. \quad (16)$$

Диференціальне наближення передбачає, що[31]

$$f_d = f_d^{(0)} + \mu f_d^{(1)}. \quad (17)$$

Об'єднуючи рівняння (16) і (17), маємо,

$$G_d = 4\pi \int \hbar\omega D(\omega) f_d d\omega, \quad (18)$$

$$q_d = -\frac{1}{3}lv_g \frac{\partial G_d}{\partial x}, \quad (19)$$

з граничними умовами Маршака[31,34],

$$\begin{aligned} \frac{G_d(0)}{4} + \frac{1}{2}q_d(0) &= 0, \\ \frac{G_d(L_x)}{4} - \frac{1}{2}q_d(L_x) &= 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Як вибрати граничну умову - це важливе питання для балістично-дифузійної теплопередачі. Для рівняння фононного радіаційної теплопередачі Joshi та Majumdar[32] запропонували граничну умову у вигляді інтенсивності фононів, що дуже схоже на те, що застосовується у тепловому випромінюванні, тоді як у балістично-дифузійних рівняннях Chen[31,34] отримав граничну умову Маршака. Крім того, Alvarez та Jou[33] вводили граничний тепловий опір для вирішення цього питання. Згідно з посиланнями [34, 35], оскільки границя не сприяє дифузійній складовій, дифузійний тепловий потік на границі складається лише з прихильних дифузійних носіїв. Тоді гранична умова Маршака, яка широко використовується у тепловому випромінюванні та нейтронному транспорті, може бути виведена за допомогою диференціального наближення[34]. У цій роботі для дифузійної складової обрано граничну умову Маршака, рівняння (20). Схожий вибір був зроблений у роботі Офле [35], де задача теплового випромінювання була

вирішена методом розділення. Балістичний транспортування призводить до стрибків температури на границях у напрямку x [26], що може бути охарактеризовано рівнянням (20).

Згідно з рівнянням збереження енергії,

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial q_s}{\partial x} + \frac{\partial q_d}{\partial x} = \frac{\partial q_s}{\partial x} - \frac{1}{3} l v_g \frac{\partial^2 G_d}{\partial x^2} = \dot{S}. \quad (21)$$

Об'єднуючи рівняння (15), (20) і (21), отримуємо вираз для G_d :

$$\begin{aligned} G_d(x) = & \frac{3\tau}{8} \dot{S} \left[\exp \left(-2 \frac{L_x - x}{l} \right) + \exp \left(-2 \frac{x}{l} \right) \right] - \frac{3\tau}{2} \dot{S} \left(\frac{x}{l} \right)^2 \\ & + \frac{3\tau}{2} \dot{S} \frac{L_x}{l} \frac{x}{l} - \frac{7\tau}{8} \dot{S} + \frac{\tau}{8} \dot{S} \exp \left(-2 \frac{L_x}{l} \right) + \tau \dot{S} \frac{L_x}{l}. \end{aligned} \quad (22)$$

Таким чином, отримуємо

$$\begin{aligned} G(x) = & G_d + G_s \\ = & -\frac{\dot{S}\tau}{8} \left[\exp \left(-2 \frac{L_x - x}{l} \right) + \exp \left(-2 \frac{x}{l} \right) \right] \\ & + \frac{\dot{S}\tau}{8} \left[1 + \exp \left(-2 \frac{L_x}{l} \right) \right] + \frac{3\dot{S}\tau}{2l^2} (L_x - x)x + \frac{L_x}{l} \dot{S}\tau \end{aligned} \quad (23)$$

Посилаючись на рівняння (10), функція розподілу температури виводиться з рівняння (23),

$$\begin{aligned} T_{Kn_x}^*(\eta) = & \frac{T - T_0}{(\dot{S}L_x^2/8k_{bulk})} = 4(1 - \eta)\eta + \frac{8}{3}Kn_x \\ & - \frac{Kn_x^2}{3} \left[\exp \left(-2 \frac{1 - \eta}{Kn_x} \right) + \exp \left(-2 \frac{\eta}{Kn_x} \right) \right] \\ & + \frac{Kn_x^2}{3} \left[1 + \exp \left(-\frac{2}{Kn_x} \right) \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Профілі температури поперечного теплопровідності в наноплівках з внутрішнім джерелом тепла показані на рис. 2. Усі величини перетворені у безрозмірні: безрозмірна температура T^* визначається як $T^* = 8k_{bulk}(T - T_0)/(\dot{S}L_x^2)$; безрозмірна координата η - як x/L_x , а число Кнудсена Kn_x визначається як $Kn_x = l/L_x$. При $Kn_x = 0$, безрозмірний профіль температури відповідає закону Фур'є, а саме $T_F^*(\eta) = 4(1 - \eta)\eta$. Стрибки температури відбуваються на границях і збільшуються зі зростанням числа Кнудсена Kn_x .

Крім того, безрозмірна температура збільшується зі зростанням Kn_x , що свідчить про зменшення ефективної теплопровідності. Виявлено, що рівняння (24) добре передбачає розподіл температури, отриманий внаслідок Монте-Карло симуляцій в режимі малих чисел Кнудсена, тоді як в режимі великих чисел Кнудсена, через порушення диференціального наближення, ця модель недооцінює збільшення температури.

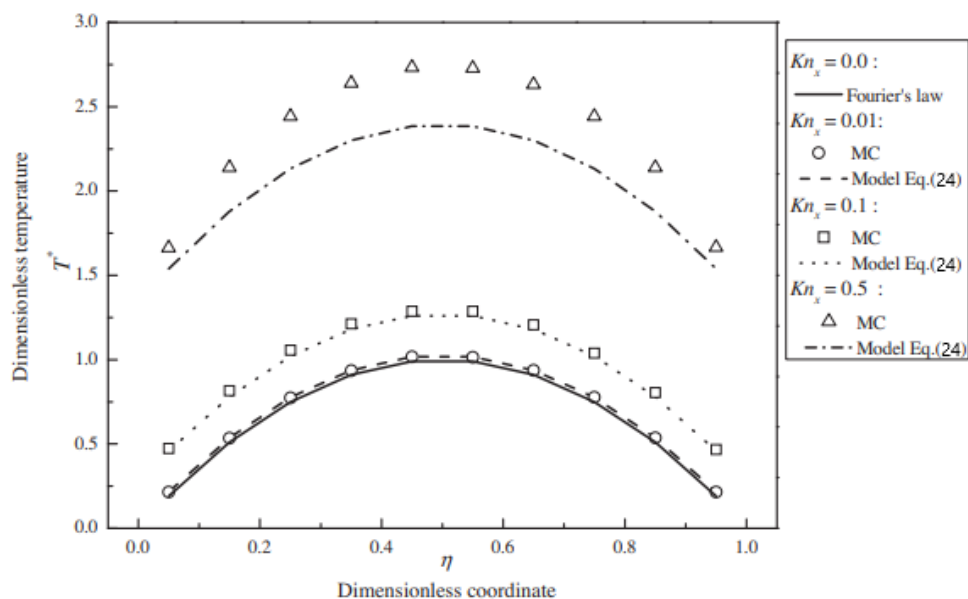


Рис. 2. Розподіли температури поперечної теплопровідності в наноплівках з внутрішнім джерелом тепла.

Крім того, об'єднавши рівняння (3) і (24), ми отримуємо модель для поперечної ефективної теплопровідності в схемі з внутрішнім джерелом тепла

$$\frac{k_{l_film_cr}}{k_{bulk}} = \frac{1}{1 + 4Kn_x + \frac{Kn_x^2}{2} \left[1 + \exp\left(-\frac{2}{Kn_x}\right) \right] + \frac{Kn_x^3}{2} \left[\exp\left(-\frac{2}{Kn_x}\right) - 1 \right]}, \quad (25)$$

де $k_{bulk} = \rho c_v l v_g / 3$. Маджумдар [36] запропонував сірий модель для поперечної ефективної теплопровідності наноплівок у схемі TD.

$$\frac{k_{T_film_cr}}{k_{bulk}} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3}Kn_x}. \quad (26)$$

У режимі малих чисел Кнудсена високопорядкові члени Kn_x у рівнянні (25) можна ігнорувати, і воно зводиться до $k_{I_film_cr}/k_{bulk} \approx 1/(1 + 4Kn_x)$, що має ту саму форму, що і сіра модель, тобто рівняння (26).

На рисунку 3 показана поперечна ефективна теплопровідність наноплівки. Ефективна теплопровідність зменшується зі зростанням числа Кнудсена Kn_x як у схемі з внутрішнім джерелом тепла, так і у схемі TD, при цьому ефективна теплопровідність $k_{I_film_cr}$ у схемі з внутрішнім джерелом тепла значно нижча, ніж $k_{I_film_cr}$ у схемі TD. Крім того, поточна модель для $k_{I_film_cr}$, рівняння (25), узгоджується з симуляціями Монте-Карло, особливо в режимі малих чисел Кнудсена. Однак, зі зростанням числа Кнудсена, рівняння (25) трохи переоцінює ефективну теплопровідність.

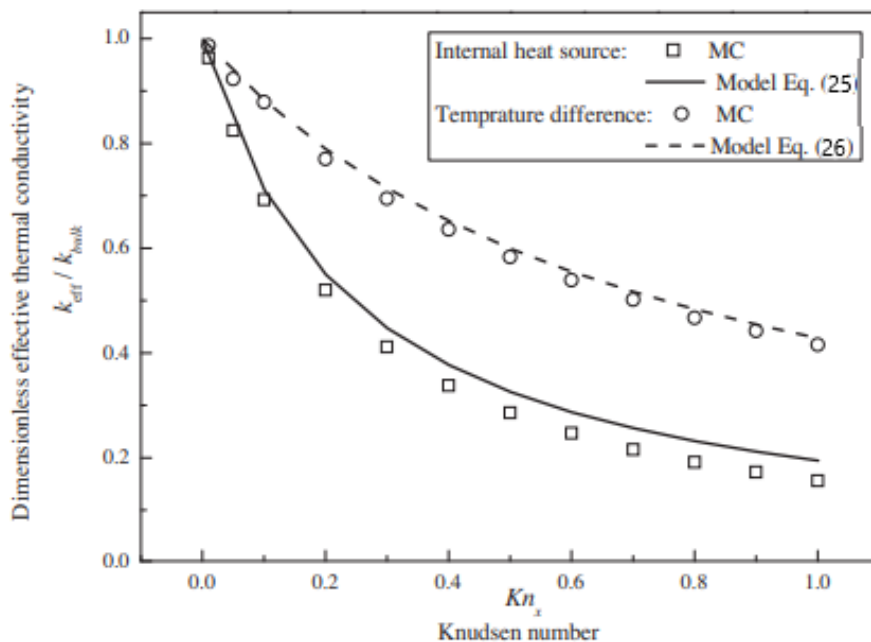


Рис. 3. Поперечна ефективна теплопровідність наноплівки проти числа Кнудсена (Kn_x).

Тепер розглянемо ефективну поздовжню теплопровідність наноплівки. Для характеристики поздовжньої теплопередачі фононів у наноплівках використовується двовимірне рівняння Больцмана для фононів.

$$v_{gx} \frac{\partial f}{\partial x} + v_{gy} \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f_0 - f}{\tau} + \dot{S}_\Omega. \quad (27)$$

Отримати аналітичну модель ефективної теплопровідності напряму з рівняння (27) складно. Однак, коли джерело зникає, рівняння (27) зводиться до

основного рівняння в схемі TD. Модель ефективної теплопровідності в площині для схеми TD була отримана[22]

$$\frac{k_{T_film_in}}{k_{bulk}} = 1 - \frac{3}{2}Kn_y \int_0^{\pi/2} \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{\cos(\theta)Kn_y}\right) \right] \sin^3(\theta) d\sin(\theta), \quad (28)$$

в якій $Kn_y = l/L_y$. Зауважимо, що рівняння (28) можна приблизно спростити, $k_{T_film_in}/k_{bulk} \approx 1/(1 + 3/8Kn_y)$ [10]. Посилаючись на правило Маттієссена, ми можемо зробити висновок, що моделі ефективної теплопровідності мають однакову форму, $k_{eff}/k_{bulk} = 1/(1 + \alpha Kn)$, де параметр α відображає розмірний ефект під різними умовами. Таким чином, форма моделі ефективної теплопровідності в площині в схемі з внутрішнім джерелом тепла виражається як

$$\frac{k_{I_film_in}}{k_{bulk}} = \frac{1}{1 + \alpha_{I_film_in}Kn_y}, \quad (29)$$

де параметр $\alpha_{I_film_in}$ можна отримати за допомогою найкращого підгону з симуляціями Монте-Карло. На рисунку 4 показано залежність ефективної теплопровідності в площині наноплівки від числа Кнудсена (Kn_y). Виявлено, що ефективна теплопровідність зменшується зі збільшенням Kn_y як у схемі TD, так і у схемі з внутрішнім джерелом тепла, причому ефективна теплопровідність в схемі з внутрішнім джерелом тепла нижча, ніж у схемі TD. Параметр $\alpha_{I_film_in}$ для ефективної теплопровідності в площині в схемі з внутрішнім джерелом тепла дорівнює 0.65, розрахований за найкращим підгоном з симуляціями Монте-Карло на рисунку 5, і він більший, ніж параметр $\alpha_{T_film_in} = 3/8$, у схемі TD.

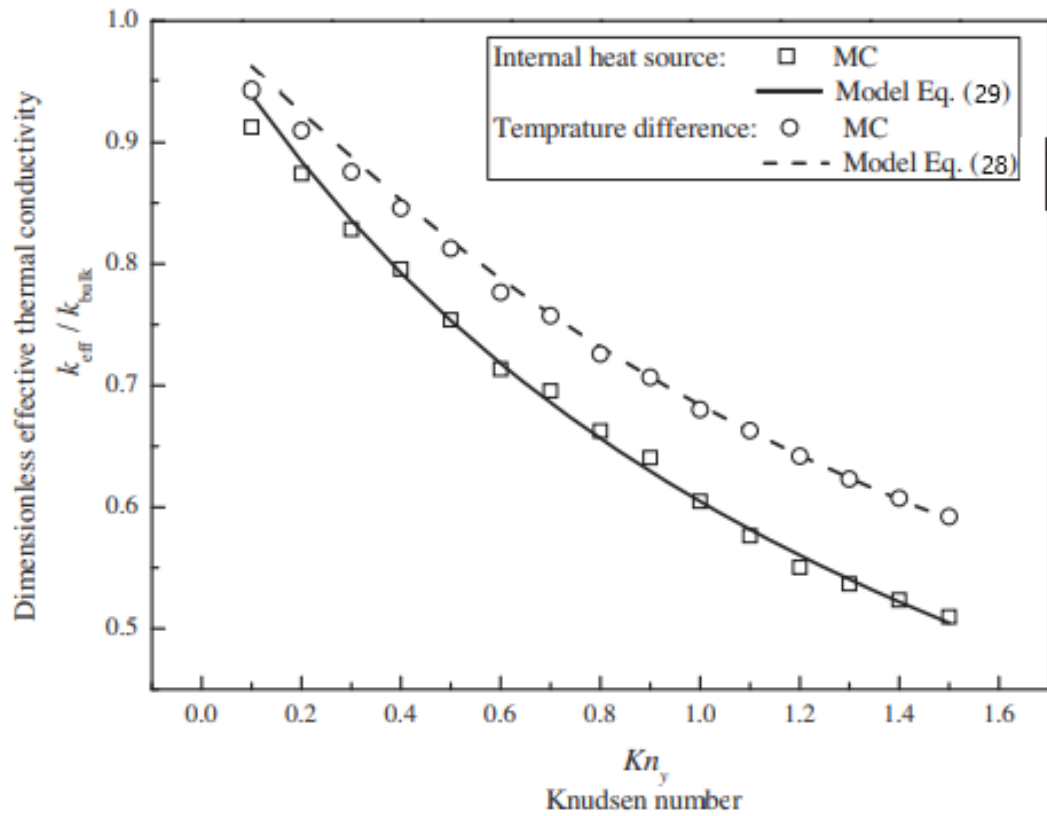


Рис. 4. Поздовжня ефективна теплопровідність наноплівки проти числа Кнудсена (Kn_y).

Крім того, температурний розподіл характеризується рівнянням дифузійної теплопередачі з ефективною теплопровідністю, k_{I_in} .

$$k_{I_film_in}(Kn_y) \frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} + \dot{S} = 0. \quad (30)$$

За формулою (30), функція безрозмірних температурних розподілів у наноплівках є такою:

$$T_{Kn_y}^*(\eta) = 4(1 + \alpha_{I_film_in} Kn_y)(1 - \eta)\eta. \quad (31)$$

Безрозмірні температурні розподіли у наноплівках в площині з внутрішнім джерелом тепла показані на рисунку 5. Зі збільшенням Kn_y через у-напрямні межеві розсіювання, безрозмірна температура зростає порівняно з

$T_F^*(\eta) = 4(1 - \eta)\eta$. Оскільки температурні розподіли все ще мають параболічну форму і на x-напрямних межах не відбувається значного стрибка температури, рівняння (31) добре передбачає температурні розподіли, обчислені за допомогою симуляцій Монте-Карло.

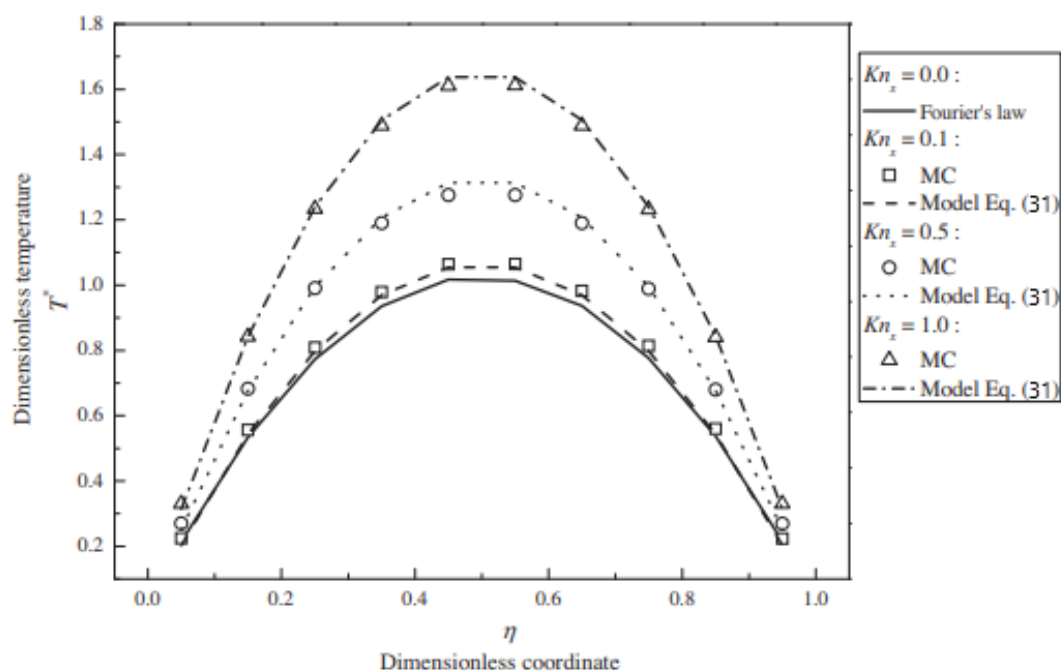


Рис. 5. Температурний розподіл поздовжньої теплопередачі в наноплівках з внутрішнім джерелом тепла.

Виявлено, що ефективна теплопровідність наноструктур з внутрішнім джерелом тепла значно нижча, ніж у випадку з різницею температур, хоча вона все ще зростає зі збільшенням характеристичної довжини. Моделі ефективної теплопровідності та розподілу температур для поздовжньої теплопередачі наноплівки з внутрішнім джерелом тепла безпосередньо походять з рівняння фононного переносу Больцмана, і порівняння з Монте-Карло симуляціями підтверджують їхню вірогідність.

Таблиця 1. Параметри для моделей ефективної теплопровідності

		The TD scheme	The IHS scheme
Nanofilm	Cross-plane	4/3	4
	In-plane	3/8	0.65

3. НЕЗВИЧАЙНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕПЛОПЕРЕДАЧІ ВІД ТИПУ РОЗСІЮВАННЯ В ДОВГИХ ПРОВІДНИКАХ

3.1 Постановка задачі

Під час моделювання теплопереносу в наноребрах було виявлено надзвичайно велику залежність теплового потоку, а відповідно, коефіцієнта теплопровідності, від ступеня дзеркальності фононного відбиття від бічних меж. З числових обчислень випливає, що додавання мінімально дифузного розсіювання повинно призвести до різкого збільшення теплового опору провідника. З урахуванням важливості вибору оптимальних теплових параметрів у нанотехнологіях, ми проведемо аналіз знайдених залежностей, обговоримо фізичні причини цієї аномальної поведінки та зробимо висновки про важливість досягнення якості інтерфейсу нанопровідника для створення теплових контактів з заданою або оптимальною теплопровідністю.

Залежність ефективності теплопереносу в двовимірних наноребрах від довжини і ширини зразка була детально вивчена в [37, 38] у випадку чисто дифузного відбиття від межі. Слід зауважити, що межа дифузного відбиття, у якому фонон відбивається від межі ізотропно у всіх напрямках, забезпечує максимальний тепловий опір. Це відбувається тому, що у цьому випадку максимальна кількість фононів (точніше пів) піддається зворотньому відбиттю щодо напрямку вхідного фонона. Протилежним є випадок дзеркального відбиття [39, 40]. У цьому випадку зворотнє відбиття в принципі неможливе, оскільки за визначенням дзеркального відбиття компонент кінетичного моменту фонона, спрямований вздовж відбиваючої межі, не змінюється. Фактичне відбиття фонона від неідеально гладкої стінки може бути описане як певне перекриття цих двох межових випадків. У найпростішій моделі [40] вводиться поняття ймовірності спекулярності відбиття ρ , яка дорівнює одиниці для випадку дзеркального відбиття і нулю для протилежного дифузного ліміту.

3.2 Модель системи

Для опису розглянутої системи фононів ми вводимо поняття функцій розподілу вхідних фононів f_{inc} і відбитих фононів f_{spec} . Зв'язок між ними у випадку дзеркального відбиття визначається наступними відношеннями:

$$f_{\text{spec}}(k_z, k_x) = f_{\text{inc}}(k_z, -k_x) \quad (32)$$

Тут вектор $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$ є хвильовим вектором фонона. У цьому випадку вісь z обрана вздовж межі зразка, а вісь x - перпендикулярно до межі. У випадку чисто дифузного відбиття припускається, що розподіл відбитих фононів є повністю ізотропним, тобто всі кути відбиття є однаково ймовірними:

$$\begin{aligned} f_{\text{diff}}(k_z, k_x) &= f_{\text{diff}}(k \cos \phi, k \sin \phi) = f_{\text{diff}}(k, \phi) \\ &= \frac{1}{2} \eta(0 \leq \phi \leq \pi) \int_0^\pi f_{\text{inc}}(k, \tilde{\phi}) \sin \tilde{\phi} d\tilde{\phi}. \end{aligned} \quad (33)$$

Тут k - це довжина вектора хвилі, а кут ϕ вимірюється від позитивного напрямку вісі z (це кут між межею та напрямком руху фонону). Функція $\eta(0 \leq \phi \leq \pi)$ (так звана функція унітарного прямокутника), описує рівномірний розподіл відбитих фононів по всьому діапазону кутів від нуля до π . У змінних k і ϕ відношення (1) має вигляд:

$$f_{\text{spec}}(k, \phi) = f_{\text{inc}}(k, \phi) \quad (34)$$

Згідно з моделлю, що використовується в [40], у проміжному випадку функція розподілу відбитих фононів має вигляд:

$$f_{\text{refl}}(k, \phi) = p f_{\text{spec}}(k, \phi) + (1 - p) f_{\text{diff}}(k, \phi) \quad (35)$$

У ролі об'єкта дослідження ми розглядаємо довгі наноплівки, довжина яких перевищує ширину від 10 до 100 разів. При ввімкненні стаціонарного обігрівача, який забезпечує постійну температуру з одного боку, та

визначається відношенням (40), яке для функцій розподілу, залежних від координат, можна переписати як

$$F_{\text{ref}}(z, \phi) = pF_{\text{inc}}(z, \phi) + \frac{1}{2}(1-p)\eta(0 \leq \phi \leq \pi) \\ \times \int_0^\pi F_{\text{inc}}(z, \tilde{\phi}) \sin \tilde{\phi} d\tilde{\phi}. \quad (37)$$

Отримані співвідношення (36) і (37) формально представляють собою систему рівнянь для визначення невідомих функцій $F_{\text{inc}}(z, \phi)$ та $F_{\text{ref}}(z, \phi)$. Розв'язання цієї системи та подальше визначення теплових потоків і коефіцієнта теплопровідності здійснюються за допомогою чисельних методів або приблизно-аналітичних методів[38].

3.3.Обговорення результатів

Чисельні розв'язки вищезазначених рівнянь показують, що для провідників з невеликими співвідношеннями між шириною W та довжиною L залежності теплового потоку від значення ρ поверхневої спекулярності виявляються досить гладкими функціями. Залежність як теплового потоку, так і коефіцієнта теплопередачі від параметрів задачі добре відображає відомі фізичні тенденції. Наприклад, збільшення довжини або зменшення ширини призводить до зменшення теплопередачі, щонайменше тому, що така зміна геометричних розмірів збільшує ймовірність повернення фонону до нагрівача. З свого боку, збільшення коефіцієнта дифузності відображення призводить до збільшення зворотного руху фононів через відбивання, що також призводить до зменшення теплового потоку через провідник. Однак для випадку досить довгих провідників $L/W > 10$ було виявлено надзвичайно різку залежність потоку тепла, а, отже, і коефіцієнта теплопровідності, від ступеня спекулярності фононного відбиття від бічних меж. Результати числових розрахунків наведено в Таблиці 1 для різниці температур на краях зразка dT ,

потіку тепла Q_c та коефіцієнта теплопередачі $K = Q_c/dT$ для різних значень ρ та різних відношень W/L .

Heat transfer unusual dependence on boundary scattering in very long narrow conductors

Table 1. The results of numerical calculations for different parameters of nanoribbon												
p	$W/L = 0.01$			$W/L = 0.03$			$W/L = 0.05$			$W/L = 0.08$		
	dT	Q_c	K	dT	Q_c	K	dT	Q_c	K	dT	Q_c	K
1	0	1	infinite	0	1	infinite	0	1	infinite	0	1	infinite
0.999	0.13	0.96	7.4	0.057	0.98	17.2	0.04	0.987	25	0.028	0.99	36
0.995	0.32	0.84	2.6	0.175	0.93	5.3	0.126	0.96	7.57	0.092	0.97	10.6
0.993	0.38	0.8	2.13	0.214	0.91	4.26	0.157	0.94	6.0	0.115	0.96	8.35
0.99	0.44	0.75	1.7	0.262	0.88	3.37	0.196	0.92	4.7	0.146	0.95	6.5
0.9	0.81	0.32	0.4	0.657	0.52	0.8	0.567	0.62	1.1	0.48	0.71	1.47
0.7	0.912	0.15	0.16	0.819	0.3	0.37	0.752	0.39	0.52	0.423	0.48	0.71
0.5	0.95	0.1	0.1	0.875	0.2	0.24	0.822	0.29	0.35	0.759	0.365	0.48

Таблиця 2. Результати числових розрахунків для різних параметрів наноплівки

З числових розрахунків випливає, що додавання мінімально дифузного розсіювання повинно призвести до різкого зростання теплового опору провідника. Приклад такої поведінки коефіцієнта теплопередачі при ρ , близькому до 1, показано на рис. 2 (а). Для обговорення фізичних причин цієї поведінки розглянемо потік тепла в цьому випадку, який показаний на рис. 2 (b).

Як можливе пояснення, ми можемо розглядати механізм, який реалізується в одновимірних провідниках у наявності розсіюючих центрів [41]. У цьому випадку ми ідентифікуємо ймовірність зворотного розсіювання з параметром $(1 - \rho)$, а довжину провідника - з кількістю розсіювальних центрів N . У цьому випадку добуток $N(1 - \rho)$, який стоїть у відношенні (12) з посиланням [5], може бути замінений значенням $aL(1 - \rho)$ для нашої задачі. Тоді для величини потоку тепла у випадку довгих провідників з низьким розсіюванням буде можливо запропонувати таку приблизну формулу:

$$Q_c = \frac{P}{p + a \frac{1-p}{W/L}} = \frac{P}{p + N_{\text{eff}}(1-p)} \quad (38)$$

де коефіцієнт підгонки виявився рівним $a = 0,4$.

Розрахунок за допомогою цієї формули показаний на рис. 2(б), з якого можна побачити хорошу якісну згоду між залежністю та результатами числових розрахунків. З цього можна зробити висновок, що довгі провідники з дуже слабким дифузним відбиттям можна вважати практично одновимірними провідниками, що містять велику кількість розсіювальних центрів.

$$N_{eff} = a \frac{L}{W} \quad (39)$$

з дуже низьким коефіцієнтом зворотного розсіювання $(1 - \rho)$.

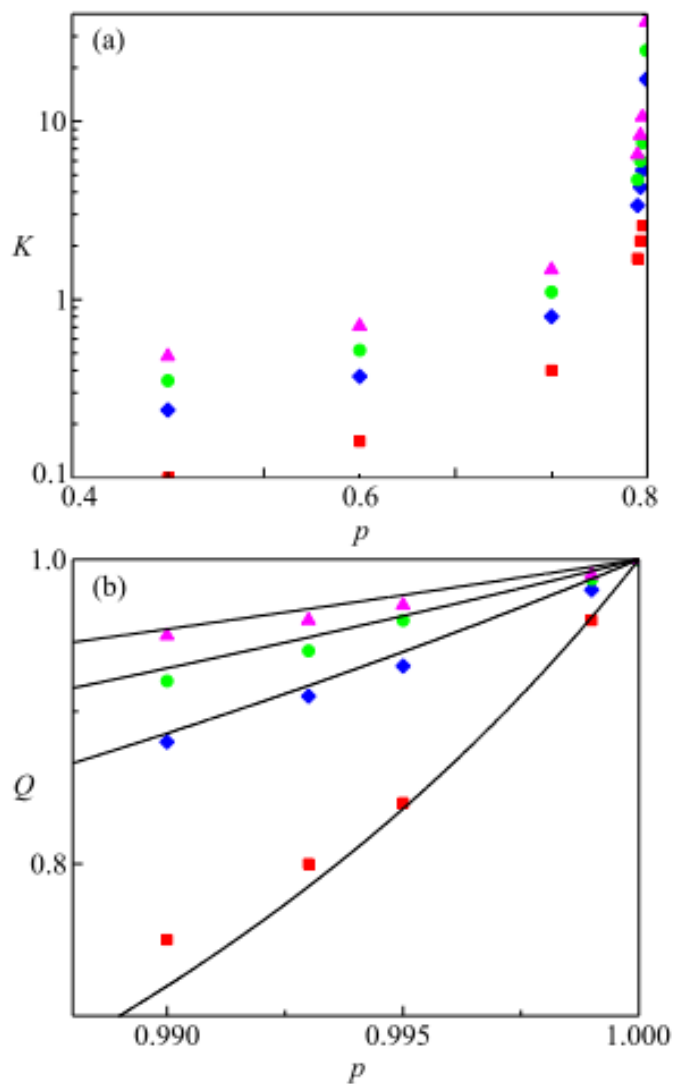


Рис. 7. Залежності коефіцієнта теплопередачі (а) та теплового потоку (б) від параметра спекулярності межі для різних співвідношень W/L

4. ВИСНОВКИ РОБОТИ

4.1 Отримані результати дослідження

Ми вивчили ефективну теплопровідність наноструктур, а саме наноплівки з внутрішнім джерелом тепла. Метод Монте-Карло використовується для моделювання переносу фононів у наноструктурах. Виявлено, що ефективна теплопровідність наноструктур з внутрішнім джерелом тепла значно нижча, ніж у випадку з різницею температур, хоча вона все ще зростає зі збільшенням характерної довжини. Моделі ефективної теплопровідності та розподілу температури для поперечної теплопровідності наноплівок з внутрішнім джерелом тепла безпосередньо походять з рівняння теплопереносу фононів Больцмана, і порівняння з симуляціями Монте-Карло добре підтверджують їхню вірогідність. Дифузне теплопровідне рівняння з ефективною теплопровідністю застосовується для характеристики розподілу температур у наноплівках. Щодо наноплівок, розташованих у площині, це рівняння добре передбачає розподіли температур

В результаті моделювання передачі тепла в наноплівках була виявлена надзвичайно висока залежність теплового потоку, а відповідно, коефіцієнта теплопровідності, від ступеня дзеркальності фононного відбивання від бокових меж. З числових розрахунків випливає, що додавання мінімально дифузного розсіювання повинно призвести до різкого збільшення теплового опору провідника. Для опису цього ефекту була запропонована модель, в якій такі тонкі провідники розглядалися як набір послідовних розсіювачів, число яких пропорційне довжині провідника, а коефіцієнт прямого розсіювання на такому розсіювачі дорівнює коефіцієнту дзеркальності межі.

4.2 Висновки щодо можливостей використання наноструктур у тепловідведенні

Ми розглянули, переважно, наноплівки, але наноструктури бувають різних формфакторів. Нанотрубки мають форму трубки з діаметром у нанометровому масштабі. Вони можуть бути одношаровими (SWCNTs) або

багатошаровими (MWCNTs) і зазвичай виготовлені з вуглецю. Нанотрубки мають унікальні механічні, електричні та теплові властивості завдяки своїй трубчастій структурі та розташуванню атомів. Вони мають потенційні застосування в таких областях, як електроніка, зберігання енергії та біомедична інженерія. Нанодроти - це наномасштабні циліндричні структури з діаметром від кількох нанометрів до кількох сотень нанометрів і довжиною, яка може становити кілька мікрометрів або міліметрів. Вони можуть бути виготовлені з різних матеріалів, таких як метали, напівпровідники та ізолятори. Нанодроти мають унікальні властивості завдяки своєму малому розміру, наприклад, високе співвідношення поверхні до об'єму та ефекти квантового обмеження, що робить їх корисними для ряду застосувань в електроніці, енергетиці та біомедицині. Наприклад, нанодроти можуть використовуватися як електричні провідники, транзистори та електроди для батарей. Нанопористі матеріали з порами або порожнинами у нанометровому масштабі (зазвичай 1-100 нм). Ці пори можуть бути однорідними за розміром або мати контрольований розподіл розмірів пір. Нанопористі матеріали мають високе співвідношення поверхні до об'єму, що робить їх корисними для різних застосувань, таких як каталіз, сепарація, зберігання енергії та доставка лікарських засобів. Деякі приклади нанопористих матеріалів включають цеоліти, метал-органічні каркаси (MOFs) та аерогелі з кремнезему. Структура та розмір пір можуть бути налаштовані для виконання конкретних вимог, що робить нанопористі матеріали універсальними та корисними в широкому діапазоні застосувань. Наноккомпозити - це матеріали, що складаються з матриці та наномасштабних наповнювачів (зазвичай 1-100 нм), розподілених у ній. Наномасштабні наповнювачі можуть бути виготовлені з різних матеріалів, таких як наночастинки, нанотрубки та наноплівки, і можуть значно покращити властивості матеріалу матриці. Малий розмір наповнювачів забезпечує велику площу поверхні, що може покращити механічні, теплові, електричні та оптичні властивості наноккомпозиту. Наноккомпозити мають широкий спектр

застосувань, включаючи матеріалознавство, електроніку, енергетику та біомедицину.

Властивості наноструктур сильно залежать від їхнього розміру, форми та складу, і вони часто синтезуються за допомогою таких технік, як хімічний синтез, фізичне осадження з парової фази та самозбирання. Їх унікальні властивості роблять наноструктури важливою областю досліджень з потенційними застосуваннями в таких галузях, як каталіз, електроніка, енергетика та біомедицина.

4.3 Перспективи подальших досліджень

Перспективи подальших досліджень у сфері використання наноструктур в обладнанні для теплопередачі є надзвичайно важливими і перспективними. З розвитком нанотехнологій з'являються нові можливості для підвищення ефективності теплопередачі, зменшення енергетичних витрат та оптимізації розмірів і ваги теплопередавальних систем. Однією з основних перспектив є розробка нових наноматеріалів з високою теплопровідністю. Наприклад, графен, вуглецеві нанотрубки та інші двовимірні матеріали мають надзвичайно високі коефіцієнти теплопровідності, що може значно покращити ефективність теплопередачі в різних системах. Дослідження в цій області можуть включати вивчення структурних та фізичних властивостей цих матеріалів, а також оптимізацію їхньої взаємодії з іншими матеріалами у складних багатошарових структурах.

Іншим важливим напрямком є розвиток нанофлюїдів – рідин з наночастинками, які мають покращені властивості теплопередачі. Вивчення різних комбінацій базових рідин та наночастинок, а також їхня стабільність і поведінка при різних температурах і умовах можуть відкрити нові можливості для створення високоефективних охолоджувальних систем. Використання наноструктур у теплопередавальних системах також може сприяти

зменшенню розмірів і ваги обладнання. Наприклад, у електроніці та мікроелектромеханічних системах (MEMS) використання наноматеріалів може значно зменшити тепловий опір і покращити тепловідведення, що дозволить створювати більш компактні і легкі пристрої з високою продуктивністю. Дослідження у сфері теплопередачі на нанорівні також відкривають нові можливості для створення енергоефективних будівельних матеріалів. Використання наноматеріалів у теплоізоляційних системах може значно зменшити тепловтрати у будівлях, що сприятиме зниженню енергоспоживання і покращенню енергоефективності.

Загалом, подальші дослідження у сфері використання наноструктур в обладнанні для теплопередачі мають великий потенціал для розвитку нових технологій і матеріалів, які можуть значно покращити ефективність теплопередачі, зменшити енергетичні витрати і відкрити нові можливості для різних галузей промисловості.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] E. Pop, Energy dissipation and transport in nanoscale devices, *Nano Res.* 3 (2010) 147–169.
- [2] J. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, London, 1961, p. 1–61.
- [3] D.G. Cahill, P.V. Braun, G. Chen, et al., Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012, *Appl. Phys. Lett.* 1 (2014) 011305.
- [4] R. Chen, A.I. Hochbaum, P. Murphy, et al., Thermal conductance of thin silicon nanowires, *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008) 105501.
- [5] R.B. Wilson, D.G. Cahill, Anisotropic failure of Fourier’s theory in time-domain thermosreflectance experiments, *Nat. Commun.* 5 (2014) 5075.
- [6] J. Chen, G. Zhang, B. Li, A universal gauge for thermal conductivity of silicon nanowires with different cross sectional geometries, *J. Chem. Phys.* 135 (2011) 204705.
- [7] G. Chen, C.L. Tien, Thermal conductivities of quantum well structures, *J. Thermophys. Heat Tr.* 7 (1993) 311–318.
- [8] X. Lü, W.Z. Shen, J.H. Chu, Size effect on the thermal conductivity of nanowires, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 1542–1552.
- [9] A. Sellitto, F.X. Alvarez, D. Jou, Geometrical dependence of thermal conductivity in elliptical and rectangular nanowires, *Int. J. Heat Mass Trans.* 55 (2012) 3114–3120.
- [10] A.J.H. McGaughey, E.S. Landry, D.P. Sellan, et al., Size-dependent model for thin film and nanowire thermal conductivity, *Appl. Phys. Lett.* 99 (2011) 131904.
- [11] S.C. Wang, X.G. Liang, X.H. Xu, et al., Thermal conductivity of silicon nanowire by nonequilibrium molecular dynamics simulations, *J. Appl. Phys.* 105 (2009) 014316.
- [12] D. Lacroix, K. Joulain, D. Lemonnier, Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 064305.
- [13] Y.W. Li, B.Y. Cao, Thermal conductivity of single-walled carbon nanotube with internal heat source studied by molecular dynamics simulation, *Int. J. Thermophys.* 34 (2011) 2361–2370.

- [14] B.Y.Cao,Y.W.Li,A uniform source-and-sink scheme for calculating thermal conductivity by nonequilibrium molecular dynamics,J.Ch.Phys. 133 (2010) 024106.
- [15] D.P. Sellan, J.E. Turney, A.J.H. McGaughey, et al., Cross-plane phonon transport in thin films, J. Appl. Phys. 108 (2010) 113524.
- [16] D. Li, Y. Wu, P. Kim, et al., Thermal conductivity of individual silicon nanowires, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 2934–2936.
- [17] T.K. Hsiao, H.K. Chang, S.C. Liou, et al., Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 microm in SiGe nanowires, Nat. Nanotechnol. 8 (2013) 534–538.
- [18] W. Liu, M. Asheghi, Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers, Appl. Phys. Lett. 84 (2004) 3819–3821.
- [19] W. Liu, M. Asheghi, Thermal conductivity measurements of ultra-thin single crystal silicon layers, J. Heat Trans. 128 (2006) 75–83.
- [20] J.A. Johnson, A.A. Maznev, J. Cuffe, et al., Direct measurement of roomtemperature nondiffusive thermal transport over micron distances in a silicon membrane, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 025901.
- [21] V. Deshpande, S. Hsieh, A. Bushmaker, et al., Spatially resolved temperature measurements of electrically heated carbon nanotubes, PRL. 102 (2009) 105501.
- [22] X. Wang, B. Huang, Computational study of in-plane phonon transport in Si thin films, Sci. Rep. 4 (2014) 6399.
- [23] E. Pop, R.W. Dutton, K.E. Goodson, Monte Carlo simulation of Joule heating in bulk and strained silicon, Appl. Phys. Lett. 86 (2005) 082101.
- [24] R. Yang, G. Chen, M. Laroche, et al., Simulation of nanoscale multidimensional transient heat conduction problems using ballistic–diffusive equations and phonon Boltzmann equation, J. Heat Trans. 127 (2005) 298–306.
- [25] J.P.M. Péraud, N.G. Hadjiconstantinou, An alternative approach to efficient simulation of micro/nanoscale phonon transport,Appl.Phys.Lett. 101(2012) 153114.
- [26] Y.C. Hua, B.Y. Cao, Phonon ballistic–diffusive heat conduction in silicon nanofilms by Monte Carlo simulations, Int. J. Heat Mass Trans. 78 (2014) 755– 759.

- [27] Y.C. Hua, Y. Dong, B.Y. Cao, Monte Carlo simulation of phonon ballistic diffusive heat conduction in silicon nanofilm, *Acta Phys. Sin.* 62 (2013) 244401.
- [28] G. Chen, Thermal conductivity and ballistic-phonon transport in the crossplane direction of superlattices, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 14958.
- [29] E. Pop, K.E. Goodson, Heat generation and transport in nanometer-scale transistors, *Proc. IEEE* 94 (2006) 1587–1601.
- [30] M.F. Modest, *Radiative Heat Transfer*, Academic press, 2003.
- [31] G. Chen, Ballistic–diffusive heat-conduction equations, *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 2297–2300.
- [32] A.A. Joshi, A. Majumdar, Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films, *J. Appl. Phys.* 74 (1993) 31–39.
- [33] F.X. Alvarez, D. Jou, Boundary conditions and evolution of ballistic heat transport, *J. Heat Trans.* 132 (2010) 012404.
- [34] G. Chen, Ballistic–diffusive equations for transient heat conduction from nano to macroscales, *J. Heat Trans.* 124 (2002) 320–328.
- [35] D. Olfe, A modification of the differential approximation for radiative transfer, *AIAA J.* 5 (1967) 638–643.
- [36] A. Majumdar, Microscale heat conduction in dielectric thin films, *J. Heat Trans.* 115 (1993) 7–16.
- [37]. J. Amrit, K. Nemchenko, and T. Vikhtinskaya, Effect of diffuse phonon boundary scattering on heat flow, *J. Appl. Phys.* 129, 085105 (2021).
- [38]. J. Amrit, T. Medintseva, Ye. Nemchenko, K. Nemchenko, M. Spotar, S. Rogova, and T. Vikhtinskaya, Analytical description of phonon heat flow with diffusive boundary scattering, *Fiz. Nyzk. Temp.* 49, 1056 (2023) [*Low Temp. Phys.* 49, 961 (2023)].
- [39]. H.B.G.Casimir, Note on the conduction of heat in crystals, *Physica* 5, 495 (1938).
- [40]. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*, Oxford University Press, Oxford (2001).
- [41]. J. Amrit, T. Medintseva, K. Nemchenko, and T. Vikhtinskaya, Probabilistic description for quasiparticle heat transport in one-dimensional nanostructures, *J. Appl. Phys.* 131, 244302 (2022).