A hőterjedés dinamikája vékony szilikon rétegekben

Gambár Katalin, Márkus Ferenc

Tudomány Napja 2012

Gábor Dénes Főiskola

Miről szeretnék beszélni:

- A kutatás motivációi
- A fizikai egyenletek (elméleti modellek)
- A jelterjedés különböző modellekben
- Mérések: hővezetési együttható a vastagság függvényében
- A hővezetési együttható, mint a Knudsen-szám függvénye
- Spektrumok és korrelációs függvények
- A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások

A kutatás motivációi

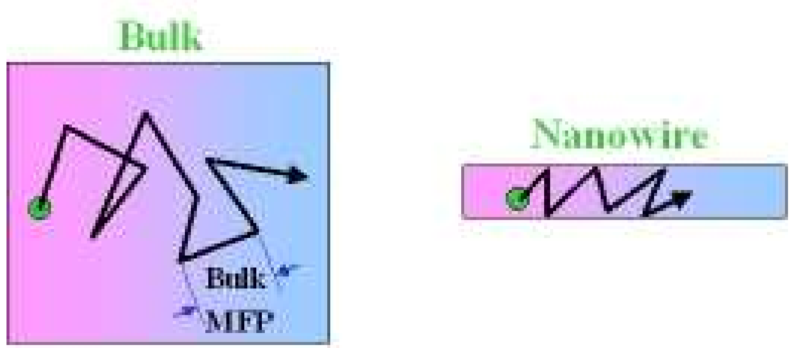
A néhány **10-100 nm vastagságú rétegen** át történő **termikus energiatranszport** vizsgálata számtalan érdekes eredményt hozott az elmúlt évtizedben.

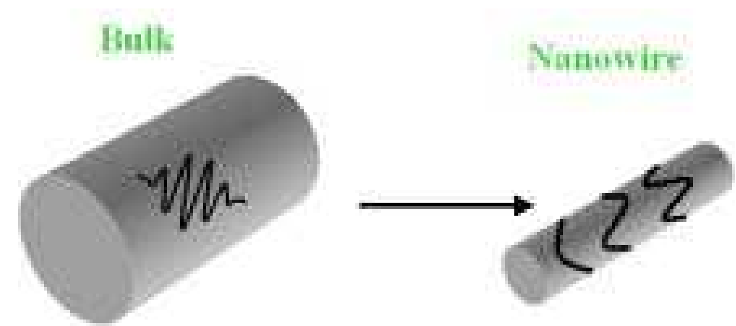
A **kísérleti tapasztalatok** (Ju et al., 1999; Cahill et al., 2003; Liu et al., 2004; Brown et al., 2005; Wang et al., 2006)

A kutatás motivációi

elméleti kutatások (Mahan et al., 1988; Chen, 2001; Henry et al., 2008) egyaránt azt mutatják, hogy

ezen a méretskálán a makroszkopikushoz képest a vezetési mechanizmus lényegesen megváltozik. Ennek az oka az, hogy a transzportban résztvevő energiahordozók (itt a fononok) átlagos szabad úthossza összemérhetővé válik a geometriai méretekkel.





A fizikai egyenletek (1)

A forrásmentes hővezetés belső energia mérlege:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\varrho c_v} \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

Fourier-törvény:

$$q = -K \frac{\partial T}{\partial x}$$

A fizikai egyenletek (2)

A hővezetés Fourier-féle egyenlete:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K}{\varrho c_v}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

A Fourier-törvény (Maxwell, 1867; Cattaneo, 1948; Vernotte, 1958) általánosítása:

$$q + \tau\frac{\partial q}{\partial t} = -K\frac{\partial T}{\partial x}$$

A fizikai egyenletek (3)

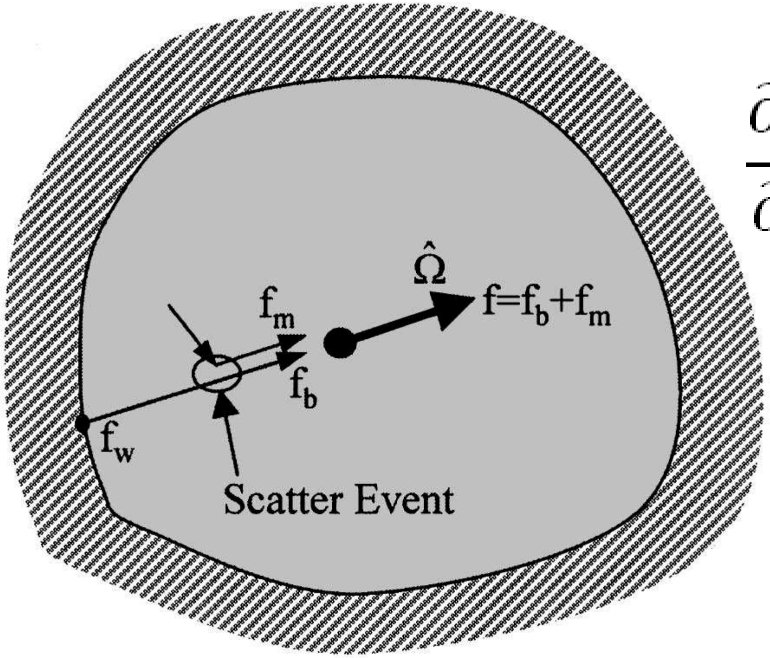
Ezt az általánosított konstitutív egyenletet valamint az energia-mérleg egyenletet felhasználva:

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K}{\varrho c_v} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

Ez az egyenlet (telegráf) a véges terjedésről valamilyen értelemben számot tud adni. Ugyanakkor olyan megoldásokat is szolgáltat, amelyek ellentmondanak a termodinamika II. főtételének (Lebon et a., 2008).

A fizikai egyenletek (4)

Kettős fáziskésésű egyenlet (Chen, 2001; Anderson et al., 2006):



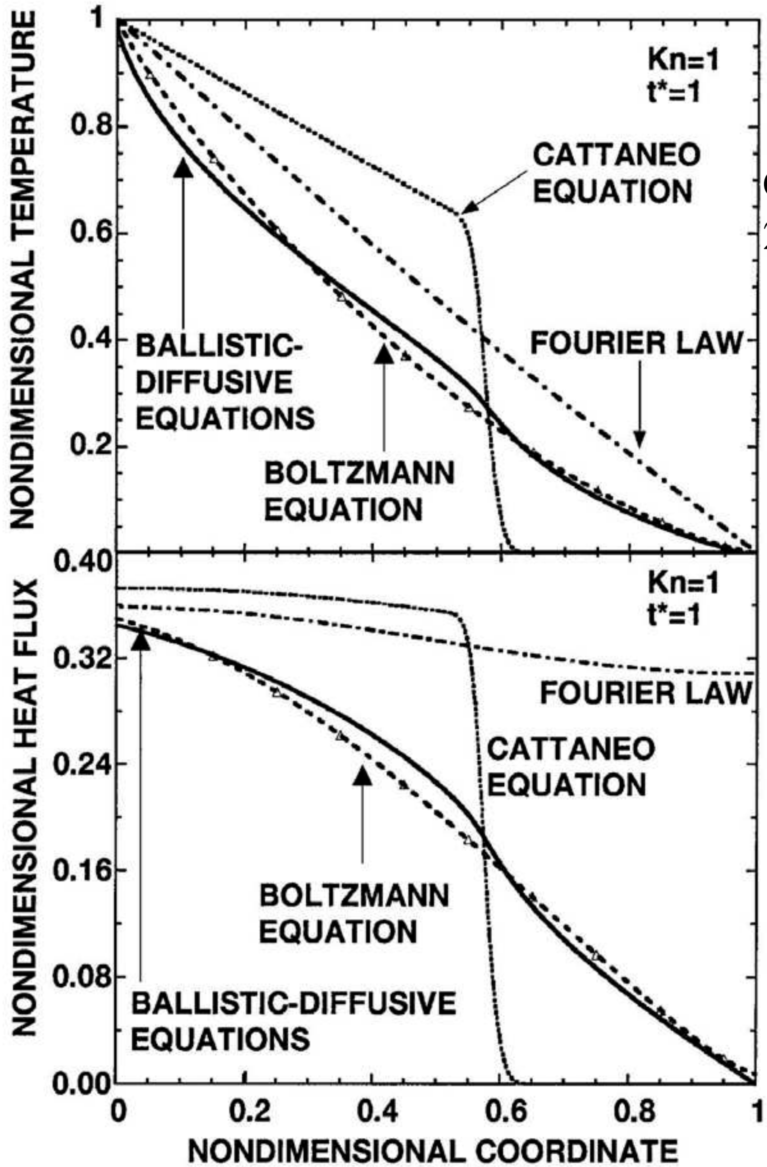
G. Chen, Phys. Rev. Lett. **86** 2297 (2001).

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f = -\frac{f - f_0}{\tau(\omega)} \quad , f = f_b + f_m$$

Boltzmann-egyenlet

$$q + \tau \frac{\partial q}{\partial t} = K \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \tau \frac{K_F}{K} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right]$$

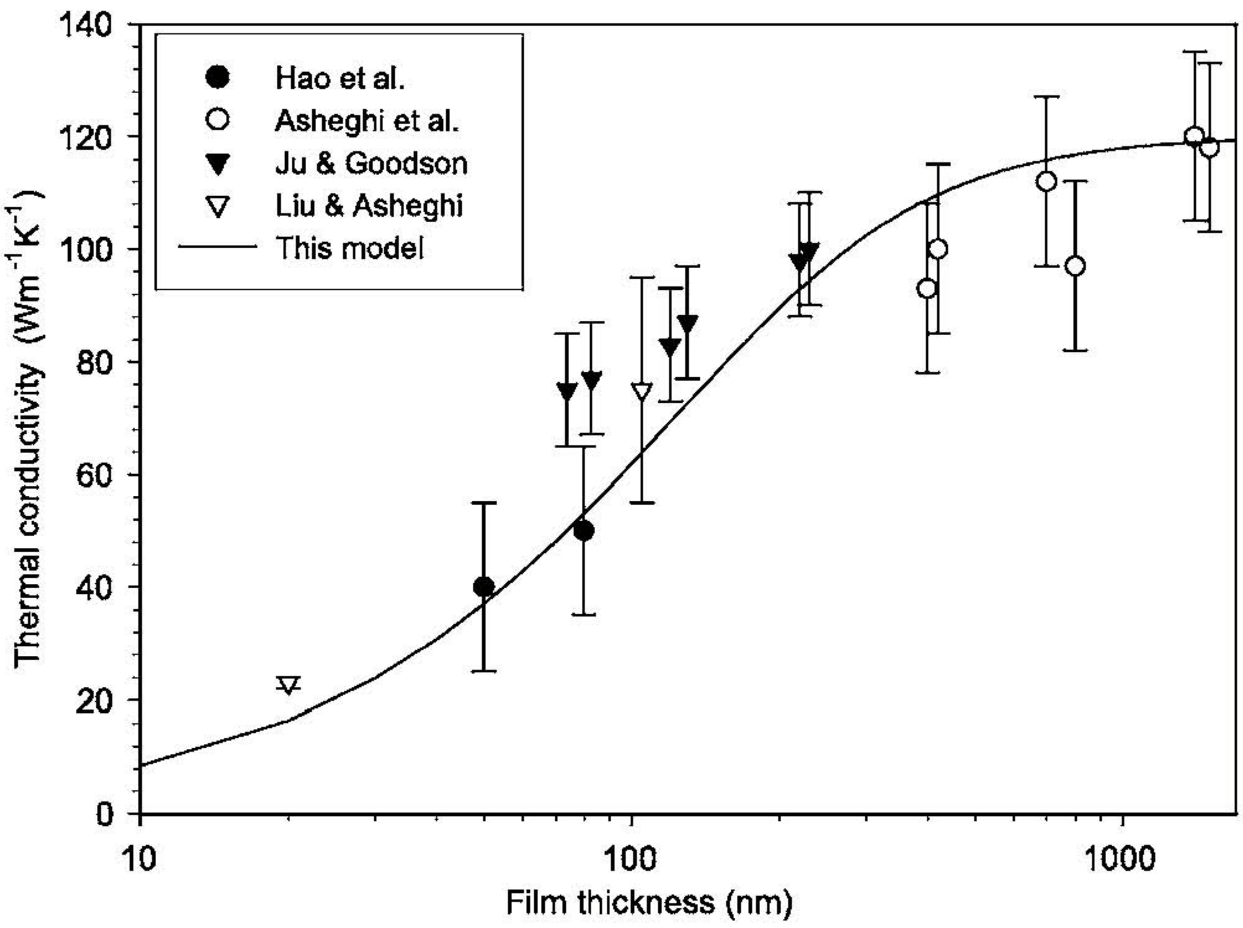
A jelterjedés a különböző modellekben



G. Chen, Phys. Rev. Lett. **86** 2297 (2001).

Mérések: hővezetési együttható a vastagság függvényében

A vezetési együttható a minta vastagságának és a fononok átlagos szabad úthosszától függ (Alvarez et al., 2007, 2008):



F. X. Alvarez et al., Appl. Phys. Lett. **90** 083109 (2007).

A hővezetési együttható Kn függése

Így:

$$K(\{Kn\}) = \frac{K}{2\pi^2\{Kn\}^2}\left[\sqrt{1+4\pi^2\{Kn\}^2}-1\right]$$

$$K_F(\{Kn\}) = \frac{K_F}{2\pi^2\{Kn\}^2}\left[\sqrt{1+4\pi^2\{Kn\}^2}-1\right]$$

Knudsen-szám:

$$\{Kn\} = \frac{l}{L}$$

A falhatás

A határon a környezet T_h hőmérsékletnek és a q hőáramnak a figyelembe vételére (Chen, 2001; Alvarez, 2010)

$$\tau_b \frac{\partial T}{\partial t} + T = T_h - qR$$

Spektrumok

A fluktuáció-disszipáció elmélet (McKane, 2001; Vázquez, 2009, 2010) módszereit alkalmazva a határfelületi és mérethatásokat is figyelembe vevő terjedő módusok **spektruma**:

$$S(k,\omega) = \left[\left(1 + \sigma\tau_b - \varrho c_v R \frac{\omega}{k}\right)^2 + \left(\tau_b\omega + \frac{\varrho c_v R\sigma}{k}\right)^2\right] \times$$

$$\frac{K(\{Kn\})k^2}{\left(\frac{K(\{Kn\})}{\varrho c_v}k^2 - \tau\omega^2\right)^2 + \left(1 + \frac{\tau K_F(\{Kn\})}{\varrho c_v}k^2\right)^2 \omega^2}$$

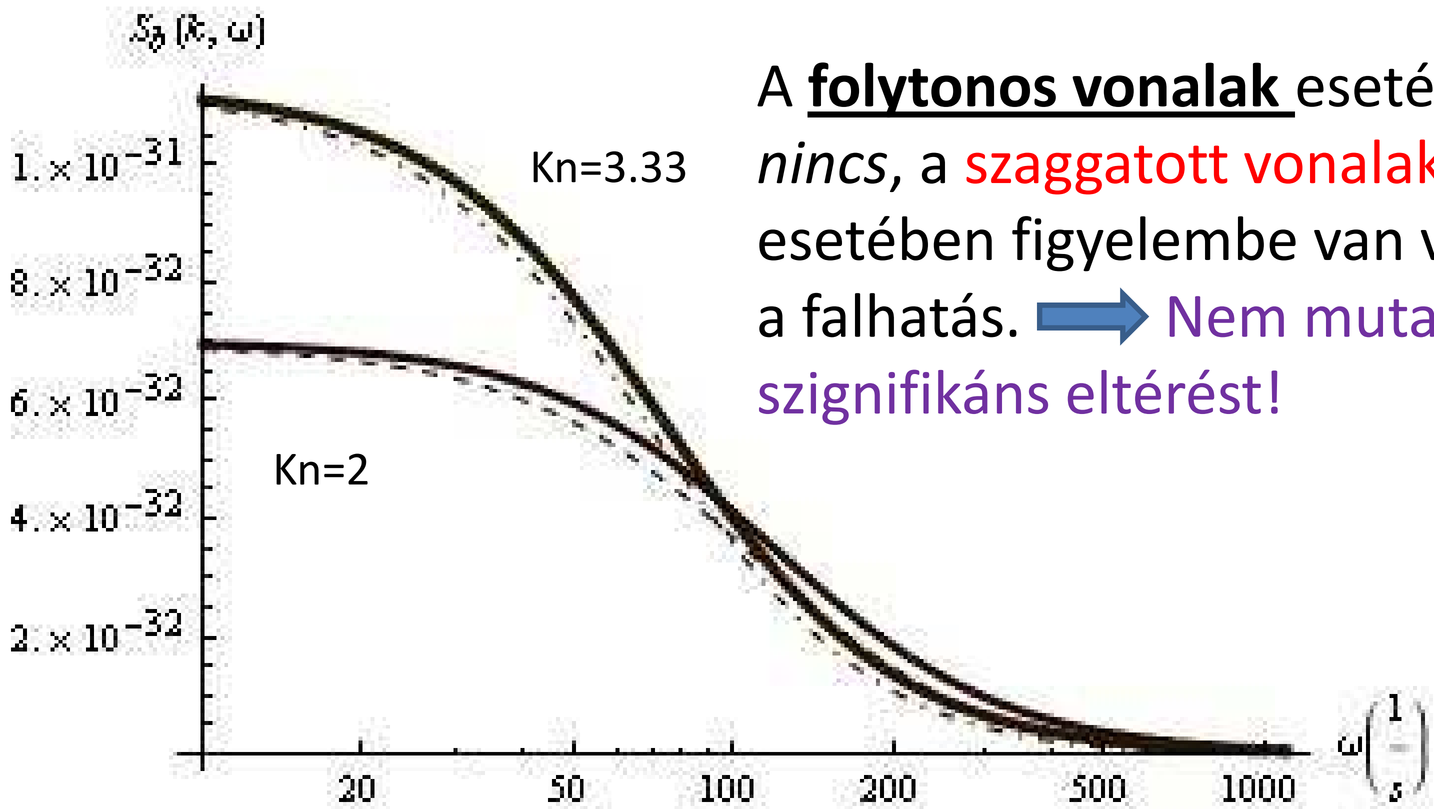
Korrelációs függvények

Az **időkorrelációs** függvény, amelyből az adott módus terjedési tulajdonságait közvetlenül le tudjuk olvasni, a spektrum Fourier-transzformáltjaként áll elő

$$C(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} S(k,\omega) e^{i\omega t} \, d\omega$$

A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások 1.

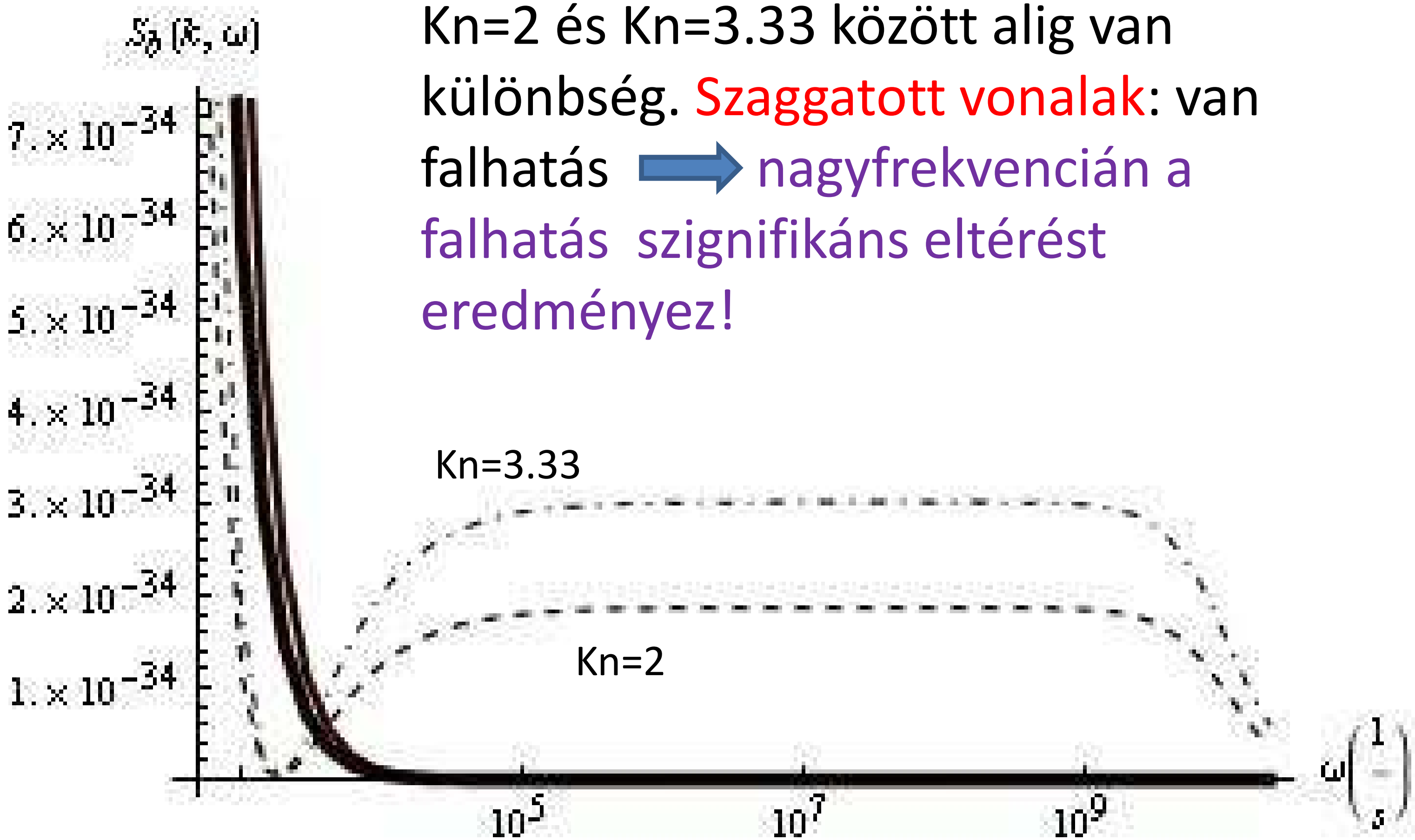
Spektrumok (külön a kis- és nagyfrekvenciás tartományok; a hullámszám k=3000 1/m) **két különböző Knudsen-számra a falhatás nélkül illetve annak figyelembe vételével:**



A **folytonos vonalak** esetében *nincs*, a szaggatott vonalak esetében figyelembe van véve a falhatás. ⇒ Nem mutat szignifikáns eltérést!

Kisfrekvenciás tartomány

A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások 2.

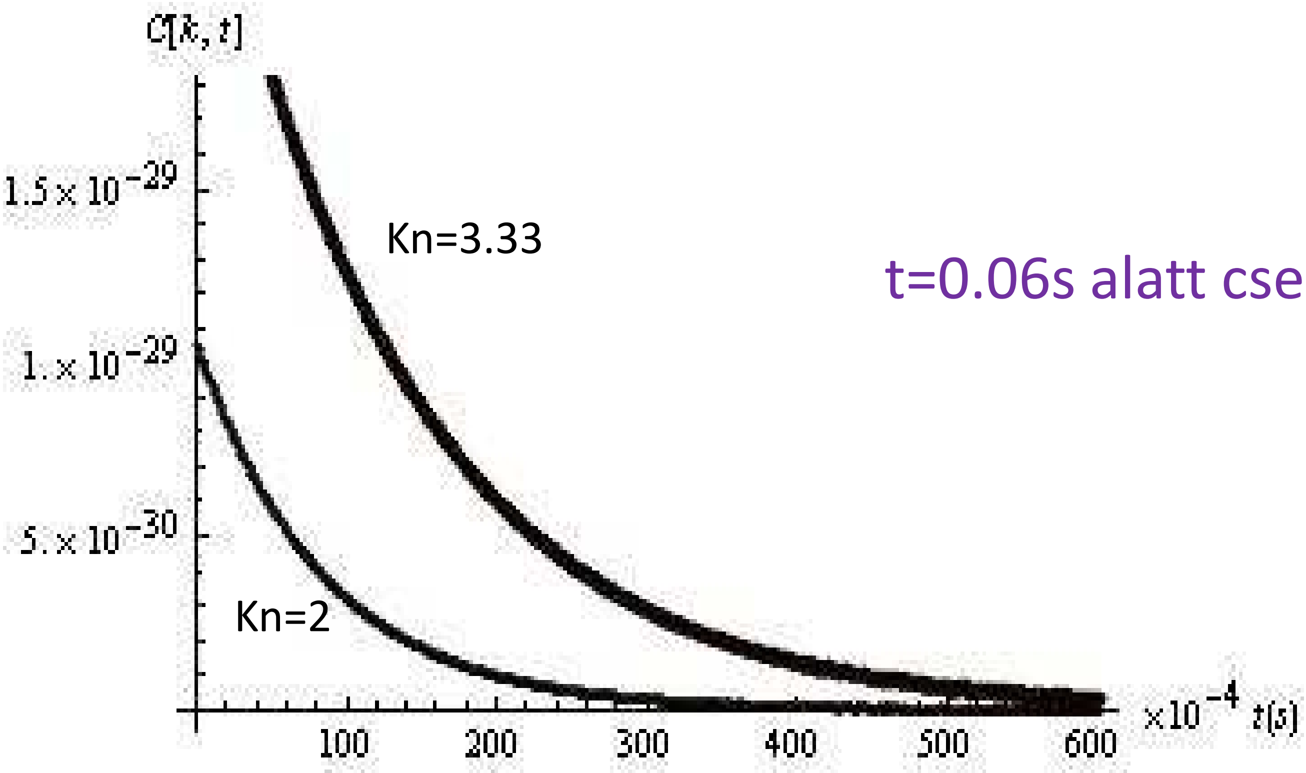


<u>Folytonos vonalak</u>: nincs falhatás, Kn=2 és Kn=3.33 között alig van különbség. Szaggatott vonalak: van falhatás ⇨ nagyfrekvencián a falhatás szignifikáns eltérést eredményez!

Nagyfrekvenciás tartomány

A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások 3.

Az **időkorrelációs függvényeket** a határeffektusok figyelembe-vétele nélkül ábrázolva a tisztán disszipatív (bomló) viselkedés azonosítható (a hullámszám k=3000 1/m):

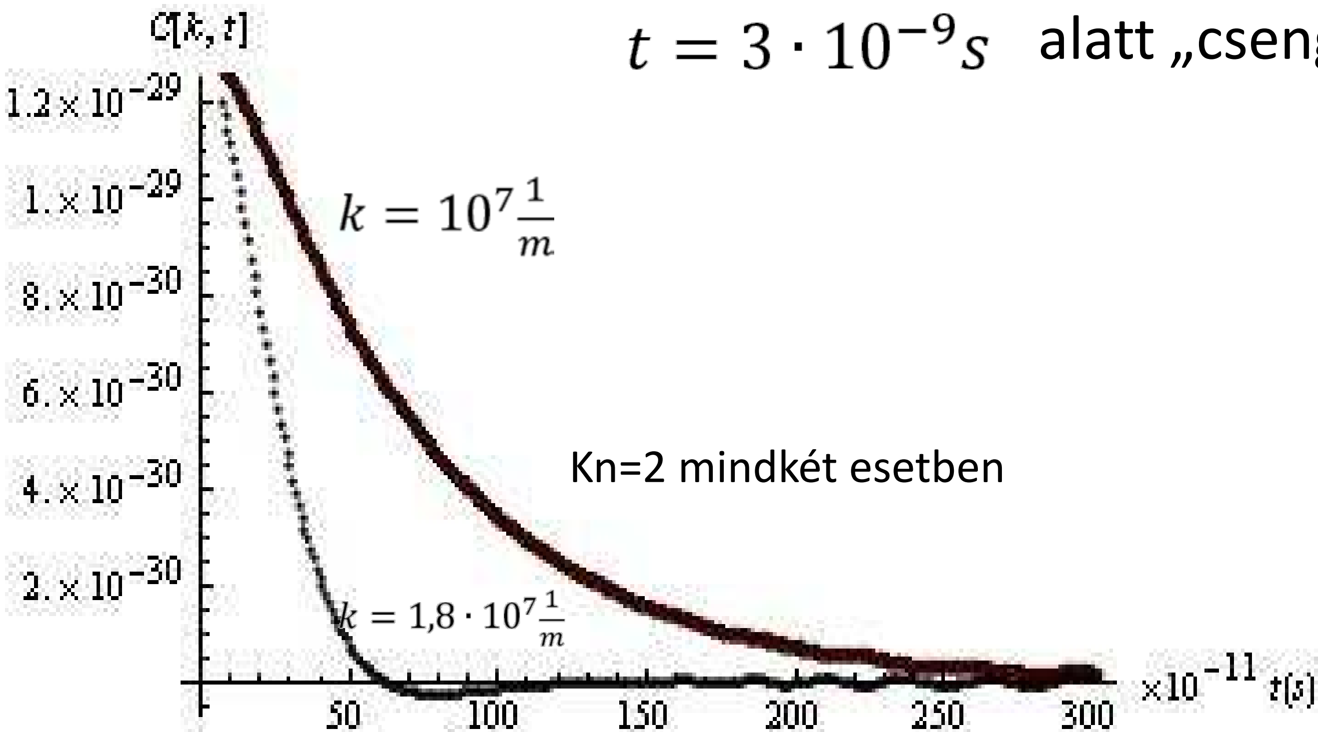


t=0.06s alatt cseng le.

A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások 4.

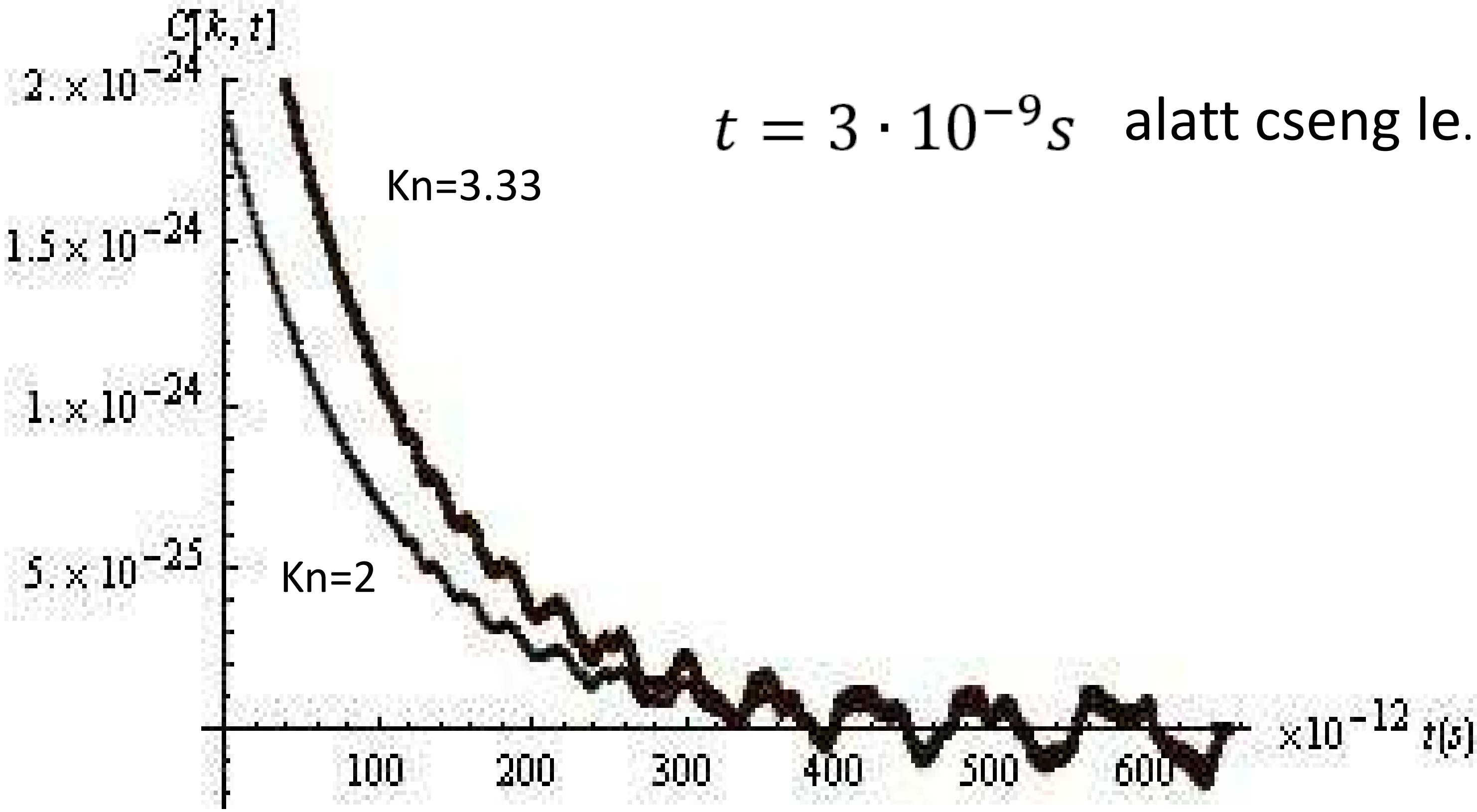
Nagyobb hullámszám ($k = 1{,}8 \cdot 10^7 \frac{1}{m}$) esetében a bomló állapot mellett megjelenik egy oszcilláló – a hullámszerű terjedésnek megfelelő – állapot. Nincs falhatás. Ez a terjedési mechanizmusban történő dinamikai fázis-átalakulás jellemzője:

$t = 3 \cdot 10^{-9} s$ alatt „cseng” le.



A határfeltételek által kontrollált dinamikai fázisátalakulások 5.

A hullámszámot k=3000 1/m értékűnek véve továbbá a falhatást „bekapcsolva” a 3. ábrán látható bomló állapot a 4. ábrán már észlelhető látható oszcilláló állapotba megy át:



$t = 3 \cdot 10^{-9} s$ alatt cseng le.

Összefoglalás

Rámutattunk a spektrum és a korrelációs függvény analízisével, hogy a méret, de különösen a falhatás következtében a termikus energia terjedési mechanizmusában megjelenik egy dinamikai fázisátalakulás, azaz a diffúzív terjedési jelleg átcsap ballisztikus (hullámszerű) terjedési jellegbe.

A hőmérséklet minden transzport jellegű fizikai folyamatban így vagy úgy megjelenik, ezért nanoméretekben is kiemelten fontos a termikus energia terjedés valamint hatásának vizsgálata.

International Journal of Heat and Mass Transfer 56 (2013) 495–500

ELSEVIER

Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

International Journal of Heat and Mass Transfer

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhmt

Heat propagation dynamics in thin silicon layers

Ferenc Márkus [a,*], Katalin Gambár [b]

[a] Department of Physics, Budapest University of Technology and Economics, Budafoki út 8, H-1521 Budapest, Hungary
[b] Dennis Gabor College, Mérnök út 39, H-1119 Budapest, Hungary

Köszönöm a figyelmet!