

多约束纳米结构的声子热导率模型研究

华钰超 曹炳阳

A model for phonon thermal conductivity of multi-constrained nanostructures

Hua Yu-Chao Cao Bing-Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 146501 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.146501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.146501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I14>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于稳态电热拉曼技术的碳纳米管纤维导热系数测量及传热研究

Thermal characterization of carbon nanotube fibers based on steady-state electro-Raman-thermal technique

物理学报.2015, 64(12): 126501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126501>

考虑界面散射的金属纳米线热导率修正

Thermal conductivities of metallic nanowires with considering surface and grain boundary scattering

物理学报.2013, 62(18): 186501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186501>

非简谐振动对纳米金刚石表面性质的影响

The influence of anharmonicity on the surface effect in nanodiamond

物理学报.2012, 61(10): 106501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.106501>

聚对苯撑/LiNi_{0.5}Fe₂O₄ 纳米复合热电材料的制备及其性能研究

Study on the preparation and properties of polyparaphenylene/LiNi_{0.5}Fe₂O₄ anocomposite thermoelectric materials

物理学报.2012, 61(7): 076502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.076502>

多约束纳米结构的声子热导率模型研究*

华钰超 曹炳阳†

(清华大学工程力学系, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084)

(2015年1月22日收到; 2015年2月27日收到修改稿)

纳米技术的快速发展使得对微纳尺度导热机理的深入研究变得至关重要. 理论和实验都表明, 在纳米尺度下声子热导率将表现出尺寸效应. 基于声子玻尔兹曼方程和修正声子平均自由程的方法得到了多约束纳米结构的声子热导率模型, 可以描述多个几何约束共同作用下热导率的尺寸效应. 不同几何约束对声子运输的限制作用可以分开计算, 总体影响则通过马西森定则进行耦合. 对于热流方向的约束, 采用扩散近似的方法求解声子玻尔兹曼方程; 对于侧面边界约束, 采用修正平均自由程的方法计算边界散射对热导率的影响. 得到的模型能够预测纳米薄膜(法向和面向)及有限长度方形纳米线的热导率随相应特征尺寸的变化. 与蒙特卡罗模拟及硅纳米结构热导率实验值的对比验证了模型的正确性.

关键词: 纳米结构, 声子热导率, 尺寸效应, 玻尔兹曼方程

PACS: 65.80.-g, 68.65.-k, 05.10.Ln

DOI: 10.7498/aps.64.146501

1 引言

近年来, 随着纳米技术的快速发展, 纳米材料热学性质的研究逐渐成为热点. 半导体纳米材料由于在微电子和热电材料等领域的广泛应用而备受关注^[1]. 实验^[2-8]和理论^[9-16]研究都表明, 纳米材料的热导率会表现出明显的尺寸效应. 对于以硅为代表的半导体材料, 声子是主要的载热子^[9]. 在微纳尺度导热中, 边界对声子运输的限制作用十分明显, 声子的平均自由程减小, 导致热导率显著降低.

人们从不同的角度对声子热导率的尺寸效应进行了深入研究^[10-16]. Filk和Tien^[10]使用修正声子平均自由程的方法得到了描述纳米薄膜热导率尺寸效应的模型. Majumdar^[11]则基于声子辐射传递方程推导了纳米薄膜法向热导率模型. Alvarez和Jou^[12]从扩展非平衡热力学的角度得到了描述薄膜面向热导率的模型. 此外, Lü等^[14]从声

子辐射传递方程出发推导了无限长方形纳米线的热导率模型. Dong等^[15]则分析了硅纳米薄膜的面向及法向导热规律, 并从声子玻尔兹曼方程和Guyer-Krumhansl方程出发推导了纳米薄膜的面向和法向热导率模型. 目前, 大多数模型都只考虑单一几何约束对热导率的影响. 然而, 在实际中声子运输将会受到多个几何约束的共同作用, 热导率也将同时与系统的多个尺寸相关. 虽然Alvarez和Jou^[13]曾使用等效特征长度的方法来描述包含多个几何约束影响的热导率尺寸效应, 但是在该方法中并未区分不同几何约束对声子运输的不同作用, 尚不能很好地解决这个问题.

本文基于声子玻尔兹曼方程和修正声子平均自由程的方法, 得到了多约束声子热导率模型. 由于边界条件的不同, 不同几何约束将会对声子运输产生不同的限制作用, 所以需要采用不同的处理方法. 对于热流所在方向的约束, 采用扩散近似的方法求解声子玻尔兹曼方程; 对于侧面边界约束, 采用修正平均自由程的方法分析边界散射对热导率

* 国家自然科学基金(批准号: 51322603, 51356001, 51136001, 51321002)、新世纪优秀人才支持计划和清华大学自主科研计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caoby@tsinghua.edu.cn

的影响. 本文模型能够预测纳米薄膜 (法向和面向) 及有限长度方形纳米线的热导率随相应特征尺寸的变化. 此外, 通过与蒙特卡罗模拟及硅纳米结构热导率实验值的对比验证了模型的正确性.

2 模型推导

图 1 为多个几何约束共同作用的导热系统示意图. T_1 和 T_2 分别是热端和冷端温度; 系统中由温差引起的热流沿 x 方向, x 方向的长度为 L_x , 边界为声子黑体边界^[11]; y 方向和 z 方向的边界绝热, 其宽度分别为 L_y 和 L_z . 声子在 y 方向和 z 方向的边界上发生完全扩散散射. 系统 x 方向的热导率同时与 L_x , L_y 和 L_z 三个尺寸相关. 定义努森数 (Knudsen number): $Kn_x = l_0/L_x$, $Kn_y = l_0/L_y$ 及 $Kn_z = l_0/L_z$, 其中 l_0 为体材料声子平均自由程. 努森数越大则对应方向上的约束对热导率的影响就越显著. 由于不同的边界条件, x 方向边界与侧面边界 (y 和 z 方向) 对声子运输的限制作用并不相同. 在 x 方向, 两端边界分别与恒温热沉相接触, 声子从边界上发射并进入系统内部; 其中一部分声子将不经过内部散射而直接从一个边界到达另一个边界, 该现象被称为弹道运输^[17]. 在 x 方向, 弹道运输导致了热导率的尺寸效应. 在 y 和 z 方向, 由于绝热条件, 声子不能穿过边界, 其将在边界上发生漫反射, 使得声子平均自由程减小, 从而导致热导率的降低.

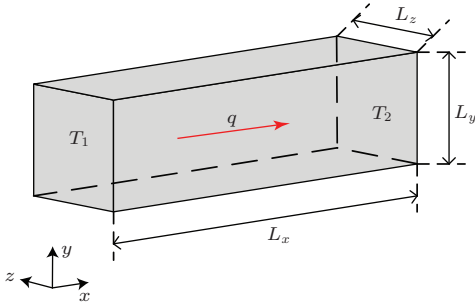


图 1 多个几何约束共同作用的导热系统示意图

Fig. 1. Schematic diagram of a multi-constrained system.

声子在纳米结构中的运输过程使用声子玻尔兹曼方程^[18]进行描述:

$$v_g \cdot \nabla f = \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (1)$$

其中 f 是声子密度分布函数, f_0 是平衡态分布函数, v_g 是声子的群速度, τ 是弛豫时间. 对于图 1 所

示系统的热导率, 直接求解声子玻尔兹曼方程难以得到解析的热导率模型. 因此, 本文提出可以先将不同的约束分开处理, 然后再通过马西森定则进行耦合得到总体影响.

2.1 热流方向边界约束

单独考虑热流所在方向 (x 方向) 的几何约束, 相应的声子玻尔兹曼方程退化为

$$l_0 \mu \frac{\partial f}{\partial x} = f - f_0, \quad (2)$$

其中 $l_0 = v_g \tau$, $\mu = \cos(\theta)$, 角度 θ 为声子传播方向与 x 方向的夹角. 使用扩散近似^[19]的方法求解上述方程, 将密度分布函数对于 l_0 进行展开:

$$f = f^{(0)} + l_0 f^{(1)} + O(l_0^2). \quad (3)$$

将 (3) 式代入到 (2) 式可以得到

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= f_0, \\ f^{(1)} &= -\mu \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4)$$

结合 (3) 和 (4) 式并忽略高阶项得到

$$f = f_0 - \mu l_0 \frac{\partial f_0}{\partial x}. \quad (5)$$

热流密度可以表示为

$$q = 2\pi \int_{-1}^1 \int_0^{\omega_{\max}} v_g \hbar \omega f D(\omega) d\omega \mu d\mu, \quad (6)$$

其中 \hbar 为狄拉克常数, $D(\omega)$ 为声子态密度, ω_{\max} 为声子的截止频率. 将 (5) 式代入 (6) 式中得到

$$q = -\frac{\rho c_V l_0 v_g}{3} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (7)$$

其中 $\rho c_V = \int_0^{\omega_{\max}} \hbar \omega [\partial f_0 / \partial T] D(\omega) d\omega$, ρ 为质量密度, c_V 为比热, $\rho c_V l_0 v_g / 3$ 等于体材料热导率 k_{bulk} . 尺寸效应由修正的边界条件进行描述^[17]

$$\begin{aligned} T_1 - T(0) &= -\frac{2l_0}{3} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_0, \\ T_2 - T(L_x) &= \frac{2l_0}{3} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{L_x}. \end{aligned} \quad (8)$$

将 (7), (8) 式与能量守恒方程 $\partial q / \partial x = 0$ 结合, 可以得到 x 方向的热流密度为

$$q_x = k_{\text{bulk}} \frac{T_1 - T_2}{L_x} \frac{1}{1 + \frac{4}{3} Kn_x}. \quad (9)$$

(9) 式可以被表示为马西森定则的形式

$$\frac{k_{0x}}{k_{\text{bulk}}} = \frac{1}{1 + \frac{l_0}{L_x}} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3} Kn_x}, \quad (10)$$

其中 k_{0x} 是当系统中同时存在 x 方向的边界约束和内部散射时的热导率. 进一步可以得到 $l_x = 3l_0/4Kn_x$, l_x 反映了 x 方向的约束对声子运输的限制.

2.2 侧面边界约束

在图 1 所示的系统中, 由于 y 方向与 z 方向的边界条件相同, 两者对于声子运输有着相同的约束机理: 声子在侧面边界上的扩散散射使得平均自由程减小, 进而导致热导率降低. 首先单独考虑 y 方向边界对声子运输的约束. 图 2 为 y 方向边界对体材料平均自由程 l_0 限制的示意图.

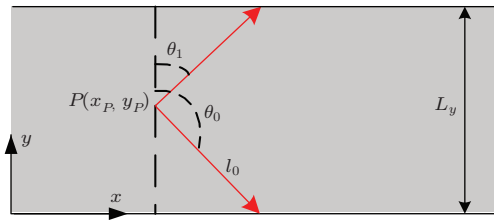


图 2 y 方向边界对声子平均自由程限制的示意图

Fig. 2. Schematic diagram of phonon transport constrained by the y -directional boundaries.

假设声子从图中所示 $P(x_P, y_P)$ 点出发, 声子传播方向与 x 方向的夹角为 θ . 当 $Kn_y > 1$ 时, 受到 y 方向边界限制的自由程为

$$l_m = \begin{cases} (L_y - y_P)/\cos(\theta) & (0 \leq \theta \leq \theta_1), \\ l_0 & (\theta_1 \leq \theta \leq \theta_0), \\ -y_P/\cos(\theta) & (\theta_0 \leq \theta \leq \pi), \end{cases} \quad (11)$$

其中 $\cos(\theta_1) = (L_y - y_P)/l_0$, $\cos(\theta_0) = -y_P/l_0$. 当 $Kn_y < 1$ 时, 则有

$$0 < y_P < l_0,$$

$$l_m = \begin{cases} l_0 & (0 \leq \theta \leq \theta_0), \\ -y_P/\cos(\theta) & (\theta_0 \leq \theta \leq \pi), \end{cases}$$

$$l_0 < y_P < L_y - l_0,$$

$$l_m = l_0,$$

$$L_y - l_0 < y_P < L_y,$$

$$l_m = \begin{cases} (L_y - y_P)/\cos(\theta) & (0 \leq \theta \leq \theta_1) \\ l_0 & (\theta_1 \leq \theta \leq \pi) \end{cases}. \quad (12)$$

对 (11) 和 (12) 式求积分平均值,

$$\bar{l}_m = \frac{1}{2L_y} \int_0^{L_y} dy_P \int_{\pi}^0 l_m d\cos(\theta), \quad (13)$$

可以得到 y 方向边界约束下的修正平均自由程为

$$\bar{l}_m = \begin{cases} \frac{l_0}{2Kn_y} \left[\ln(Kn_y) + \frac{3}{2} \right] & (Kn_y > 1), \\ l_0 \left(1 - \frac{1}{4}Kn_y \right) & (Kn_y < 1). \end{cases} \quad (14)$$

因此当存在 y 方向边界约束和内部散射时, 系统的热导率为^[10]

$$k_{0y} = \frac{\rho c_v v_g \bar{l}_m}{3} = k_{\text{bulk}} \frac{\bar{l}_m}{l_0}, \quad (15)$$

其中 k_{0y} 是当系统中同时存在 y 方向边界约束和内部散射时的热导率. 将 (15) 式写为马西森定则的形式, $k_{0y}/k_{\text{bulk}} = 1/(1 + l_0/l_y)$. 进一步可以得到

$$l_y = \frac{l_0}{\frac{l_0}{\bar{l}_m} - 1} = \begin{cases} l_0 \left[\frac{2Kn_y}{\ln(Kn_y) + \frac{3}{2}} - 1 \right]^{-1} & (Kn_y > 1), \\ l_0 \left(\frac{1}{1 - \frac{Kn_y}{4}} - 1 \right)^{-1} & (Kn_y < 1). \end{cases} \quad (16)$$

由于对声子运输有着相同的约束机制, z 方向边界约束下修正平均自由程的函数形式与 y 方向相同,

$$l_z = \begin{cases} l_0 \left[\frac{2Kn_z}{\ln(Kn_z) + \frac{3}{2}} - 1 \right]^{-1} & (Kn_z > 1), \\ l_0 \left(\frac{1}{1 - \frac{Kn_z}{4}} - 1 \right)^{-1} & (Kn_z < 1). \end{cases} \quad (17)$$

2.3 边界约束耦合

上文分别计算了不同方向的边界约束对声子运输的影响 (对声子平均自由程的限制). 它们可以根据马西森定则进行耦合

$$l_t^{-1} = l_0^{-1} + l_x^{-1} + l_y^{-1} + l_z^{-1}. \quad (18)$$

根据公式^[10] $k_e = \rho c_v v_g l_t/3$, 系统的总热导率可以表示为

$$k_e = \frac{\rho c_v v_g l_0}{3} \frac{1}{1 + l_0/l_x + l_0/l_y + l_0/l_z}. \quad (19)$$

结合 $k_{\text{bulk}} = \rho c_V l_0 v_g / 3$, 多几何约束纳米系统的热导率与相应体材料热导率之间的比值为

$$\frac{k_e}{k_{\text{bulk}}} = \frac{1}{\frac{4}{3}Kn_x + g(Kn_y) + g(Kn_z) - 1},$$

$$g(n) = \begin{cases} 2n \left[\ln(n) + \frac{3}{2} \right]^{-1} & (n > 1), \\ \frac{1}{1 - \frac{1}{4}n} & (n < 1). \end{cases} \quad (20)$$

对上述推导过程的物理机理进行分析, 对于图 1 所示的系统, x 方向的总热阻为

$$R_e = \frac{L_x}{Ak_e}, \quad (21)$$

其中 A 为截面积. $R_0 = L_x / (Ak_{\text{bulk}})$ 则表示由内部声子散射所引起固有热阻. 当系统尺寸足够大、热导率尺寸效应可以被忽略时, $R_e \rightarrow R_0$. $R_{0x} = L_x / (Ak_{0x})$ 表示当体系中只存在 x 方向的边界约束和内部散射时的热阻, 根据热阻叠加原理 $R_{0x} = R_0 + R_x$, 其中 R_x 为只有 x 方向约束时的热阻. 根据 (10) 式, 可以计算 $R_x = (4/3)Kn_x R_0 = l_0 L_x / (Ak_{\text{bulk}} l_x)$. 同理, 根据 (15) 式和热阻叠加原理 ($R_{0y(z)} = R_0 + R_{y(z)}$), 可以计算 $R_{y(z)} = l_0 L_x / (Ak_{\text{bulk}} l_{y(z)})$. 因此 (18) 式可以表示为

$$R_e = \frac{l_0 L_x}{Ak_{\text{bulk}}} (l_0^{-1} + l_x^{-1} + l_y^{-1} + l_z^{-1})$$

$$= R_0 + R_x + R_y + R_z, \quad (22)$$

即系统总的热阻等于各个分热阻之和.

3 模型验证

使用蒙特卡罗 (MC) 方法 [20,21] 直接求解声子玻尔兹曼方程, 并与模型进行对比, 如图 3 所示. 其中 Alvarez 和 Jou 的模型 [13] 为

$$\frac{k_e}{k_{\text{bulk}}} = \frac{L_e^2}{2\pi^2 l_0^2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\pi^2 l_0^2}{L_e^2}} - 1 \right), \quad (23)$$

L_e 是等效特征长度, $L_e^{-2} = L_x^{-2} + L_y^{-2} + L_z^{-2}$. 可以发现系统的热导率同时依赖于三个特征参数 Kn_x , Kn_y 和 Kn_z . 对于给定的 Kn_x 和 Kn_z , 热导率随着 Kn_y^{-1} 增加而增大, 即给定长度 L_x 及宽度 L_z 热导率随着厚度 L_y 增加而增大. 通过改变 Kn_x 和 Kn_z , 还可以发现努森数越小, 系统的热导率越

大. 此外, Kn_x 从 0.1 变为 1.0 时热导率的下降幅度比 Kn_z 从 0.01 变为 1.0 时热导率的下降幅度大, 这表明热流方向 (x 方向) 的约束对声子输运的限制作用比侧面边界 (y 和 z 方向) 的约束要强. 本文模型与蒙特卡罗模拟结果符合得很好; 但是 Alvarez 和 Jou 的模型 [13] 与模拟结果有着较大的偏差. 这表明在等效特征长度 L_e 中不加区分地将 L_x , L_y 和 L_z 进行加和的处理方法是不合理的, 几何约束由于边界条件的不同对声子输运有着不同的限制作用.

在图 4—图 6 中, 使用本文模型计算硅纳米薄膜和方形纳米线的热导率, 并与实验数据及蒙特卡罗模拟进行对比. 图 4—图 6 中的各个量都进行了无量纲化处理. 在将实验值转化为无量纲时, 体材料硅热导率值取为 150 W/mK, 体材料声子平均自由程取为 210 nm. 根据文献 [22, 23], 体材料硅室温下的声子平均自由程在 200—300 nm 之间, 所以上述平均自由程的选择是合理的.

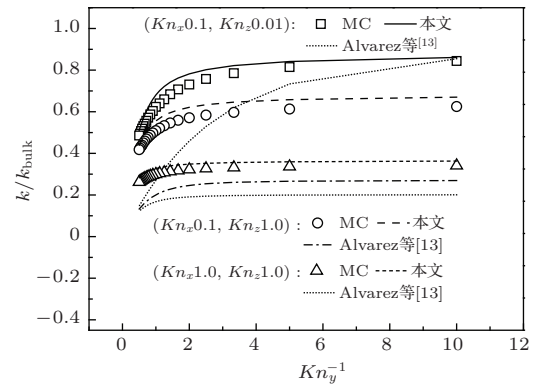


图 3 蒙特卡罗模拟与本文模型的对比

Fig. 3. Comparisons between the thermal conductivity models and the Monte Carlo simulations.

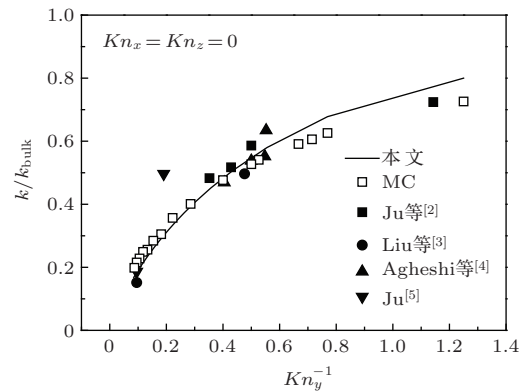


图 4 硅纳米薄膜的面向热导率

Fig. 4. In-plane thermal conductivity of silicon nanofilms.

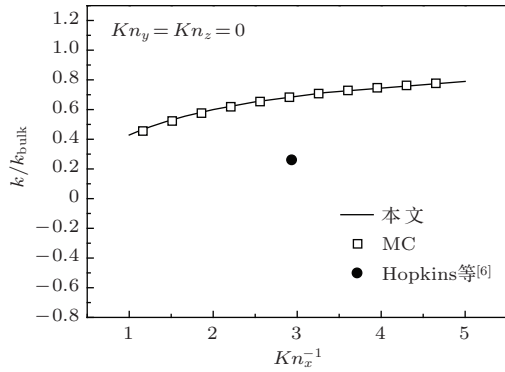


图5 硅纳米薄膜的法向热导率

Fig. 5. Cross-plane thermal conductivity of silicon nanofilms.

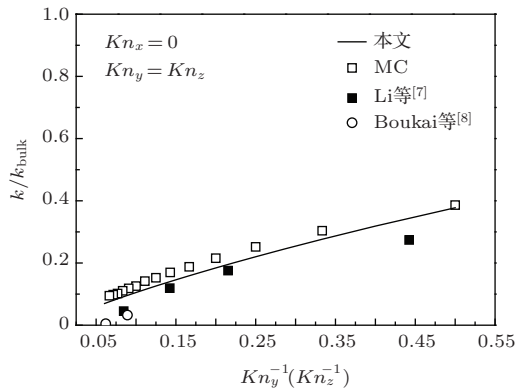


图6 硅纳米线热导率

Fig. 6. Thermal conductivity of silicon nanowires.

如图4所示, 当 Kn_x 和 Kn_y 为零时, 本文模型可以描述硅纳米薄膜面向热导率随厚度 $L_y(Kn_y^{-1})$ 的变化, 硅纳米薄膜面向热导率随着 Kn_y^{-1} 的增大而增大, 变化斜率则逐渐变小, 热导率值不断趋近体材料值($k_e/k_{\text{bulk}} \rightarrow 1$). 本文模型可以与蒙特卡罗模拟较好地符合, 同时也可以很好地刻画实验数据的变化规律. 如图5所示, 当 Kn_y 和 Kn_z 为零时, 本文模型可以用于描述薄膜法向热导率随 $L_x(Kn_x^{-1})$ 的变化, 硅纳米薄膜法向热导率随着 Kn_x^{-1} 的增加而增大, 变化斜率则逐渐变小, 热导率值不断趋近体材料($k_e/k_{\text{bulk}} \rightarrow 1$), 本模型与蒙特卡罗模拟很好地符合, 但是实验值与本文模型及模拟却有着显著的差距. 需要指出的是实验数据只有一个测点, 很难藉此判断实验数据的变化规律, 其准确性也因此成疑[16]. 当 Kn_x 为零并令 $Kn_y = Kn_z$ 时, 本文模型可以描述正方形纳米线的热导率. 如图6所示, 正方形纳米线的热导率随着 $Kn_y^{-1}(Kn_z^{-1})$ 的增加而增大, 即截面边长越大热导率越大, 本文模型与蒙特卡罗模拟可以很好地符

合. 此外, 本文模型也与圆形纳米线的实验值进行了对比. 无量纲化过程中, 取圆截面直径为特征长度. 可以发现, 当正方截面边长等于圆截面直径时, 正方形纳米线的热导率与圆形纳米线十分接近, 而且本文模型与圆形纳米线实验值随特征长度的变化规律相同.

4 结 论

本文基于声子玻尔兹曼方程和修正平均自由程的方法推导了多约束纳米结构的声子热导率模型. 不同几何约束对声子运输的限制作用可以分开计算, 总体影响通过马西森定则进行耦合. 对于热流方向的约束, 采用扩散近似的方法求解声子玻尔兹曼方程; 对于侧面边界约束, 采用修正平均自由程方法计算了边界散射对热导率的影响. 本文的模型可以描述多个几何约束共同作用下的热导率尺寸效应, 能够预测纳米薄膜法向和面向以及有限长度方形纳米线的热导率随相应特征尺寸的变化. 模型与蒙特卡罗模拟可以很好地符合, 同时也能够准确地反映实验数据的变化规律.

参考文献

- [1] Toberer E S, Baranowski L L, Dames C 2012 *Annu. Rev. Mater. Res.* **42** 179
- [2] Ju Y, Goodson K E 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3005
- [3] Liu W, Asheghi M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 3819
- [4] Asheghi M, Leung Y, Wong S, Goodson K E 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1798
- [5] Ju Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 153106
- [6] Hopkins P E, Reinke C M, Su M F, Olsson III R H, Shaner E A, Leseman Z C, Serrano J R, Phinney L M, El-Kady I 2010 *Nano Lett.* **11** 107
- [7] Li D, Wu Y, Kim P, Shi L, Yang P, Majumdar A 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2934
- [8] Boukai A I, Bunimovich Y, Tahir-Kheli J, Yu J K, Goddard III W A, Heath J R 2008 *Nature* **451** 168
- [9] Ziman J M 2001 *Electrons and Phonons: the Theory of Transport Phenomena in Solids* (UK: Clarendon Press Oxford) pp451-482
- [10] Flik M, Tien C 1990 *J. Heat Trans.* **112** 872
- [11] Majumdar A 1993 *J. Heat Trans.* **115** 7
- [12] Alvarez F, Jou D 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 083109
- [13] Alvarez F, Jou D 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 094321
- [14] Lü X, Shen W, Chu J 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 1542
- [15] Dong Y, Cao B Y, Guo Z Y 2015 *Physica E* **66** 1
- [16] McGaughey A J, Landry E S, Sellan D P, Amon C H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 131904

- [17] Hua Y C, Cao B Y 2014 *Int. J. Heat Mass Trans.* **78** 755
- [18] Kaviany M 2008 *Heat Transfer Physics* (Cambridge: Cambridge University Press) pp154–264
- [19] Siegel R, Howell J R 1990 *Thermal Radiation Transfer* (Beijing: Science Press) pp385–397 (in Chinese) [R. 西格尔, J. R. 豪厄尔 著, 曹玉璋, 黄素逸 等 译 1990 热辐射传热 (北京: 科学出版社) 第 385—397 页]
- [20] Peraud J P M, Hadjiconstantinou N G 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 153114
- [21] Hua Y C, Dong Y, Cao B Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 244401 (in Chinese) [华钰超, 董源, 曹炳阳 2013 物理学报 **62** 244401]
- [22] Pop E, Sinha S, Goodson K E 2006 *Proceedings of the IEEE* **94** 1587
- [23] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958

A model for phonon thermal conductivity of multi-constrained nanostructures*

Hua Yu-Chao Cao Bing-Yang[†]

(Department of Engineering Mechanics, Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 22 January 2015; revised manuscript received 27 February 2015)

Abstract

The rapid development of nanotechnology makes it possible to further understand nanoscale heat conduction. Theoretical analysis and experimental measurement have demonstrated the size-dependence of thermal conductivity on a nanoscale. As dielectric material (such as silicon), phonons are the predominant carriers of heat transport. Phonon ballistic transport and boundary scattering lead to the significant reduction of thermal conductivity. Various models, in which only one geometrical constraint of phonon transport is considered, have been proposed. In engineering situations the phonon transport can be influenced by multiple geometrical constraints, especially for material with long intrinsic phonon mean free path. However, at present a phonon thermal conductivity model in which the multiple geometrical constraints of phonon transport are taken into account, is still lacking. In the present paper, a multi-constrained phonon thermal conductivity model is obtained by using the phonon Boltzmann transport equation and modifying the phonon mean free path. The geometrical constraints are dealt with separately, and the effects of these constraints on thermal conductivity are then combined by the Matthiessen's rules. Different boundary conditions can lead to different influences on the phonon transport, so different methods should be used for different boundary constraints. The differential approximation method is utilized for the constraint in the direction of heat flux, while phonon scatterings on side surfaces are characterized by modifying the phonon mean free path. The model which characterizes various nanostructures including nanofilms(in-plane and cross-plane) and finite length rectangular nanowires, can well agree with the Monte Carlo simulations of different Knudsen numbers. The model with the Knudsen number Kn_x equal to 0 can well predict the experimental data for the in-plane thermal conductivity of nanofilm. When the Knudsen numbers Kn_y and Kn_z vanish, the model corresponds to the cross-plane thermal conductivity of nanofilm. Moreover, with $Kn_x = 0$ and $Kn_y = Kn_z$, the model corresponds to the square nanowires of infinite length, and the similar slopes between the model and the experimental data of nanowires can be achieved.

Keywords: nanostructures, phonon thermal conductivity, size effect, Boltzmann transport equation

PACS: 65.80.-g, 68.65.-k, 05.10.Ln

DOI: 10.7498/aps.64.146501

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51322603, 51356001, 51136001, 51321002) and the Program for New Century Excellent Talents in University, Tsinghua University Initiative Scientific Research Program, China.

† Corresponding author. E-mail: caoby@tsinghua.edu.cn