

# Computational modeling and spectral analysis of nanoscale energy transfer

**Kimmo Sääskilahti**

A doctoral dissertation completed for the degree of Doctor of Science (Technology) to be defended, with the permission of the Aalto University School of Science, at a public examination held at the lecture hall XX of the school on XX XX 2015 at XX.

**Aalto University**  
**School of Science**  
**Department of Neuroscience and Biomedical Engineering**  
**Engineered Nanosystems group**

**Supervising professor**

Prof. Jukka Tulkki

**Thesis advisor**

D.Sc. (Tech.) Jani Oksanen

**Preliminary examiners**

Prof. Ilari Maasilta, University of Jyväskylä, Finland

Ph.D. Samy Merabia, Université de Lyon, France

Aalto University publication series

**DOCTORAL DISSERTATIONS** 0/2015

© Kimmo Sääskilahti

ISBN 000-000-00-0000-0 (printed)

ISBN 000-000-00-0000-0 (pdf)

ISSN-L 1799-4934

ISSN 1799-4934 (printed)

ISSN 1799-4942 (pdf)

<http://urn.fi/URN:ISBN:000-000-00-0000-0>

Unigrafia Oy

Helsinki 2015

Finland



**Author**

Kimmo Sääskilahti

**Name of the doctoral dissertation**

Computational modeling and spectral analysis of nanoscale energy transfer

**Publisher** School of Science

**Unit** Department of Neuroscience and Biomedical Engineering

**Series** Aalto University publication series DOCTORAL DISSERTATIONS 0/2015

**Field of research** Computational science

**Manuscript submitted** 3 September 2015

**Date of the defence** XX.XX.XXXX

**Permission to publish granted (date)** XX.XX.XXXX

**Language** English

☐ **Monograph**

☒ **Article dissertation (summary + original articles)**

**Abstract**

Swift progress in the synthesis and processing of materials with nanoscale feature sizes has spawned new possibilities to control the flow of thermal energy. New materials and devices with engineered thermal properties are expected to enable, e.g., clean and more efficient production of energy from waste heat by thermoelectric converters, reducing the energy consumption of digital electronics, and generating novel technologies such as heat-assisted magnetic recording and phase-change memories. As the classical laws of energy transfer do not generally apply in nanoscale, practical realization of such applications calls for powerful computational methods delivering scientific understanding of nanoscale heat transfer.

The goal of this thesis is to develop new computational models and methods for describing energy transfer in atomic-scale structures and to apply the methods to generate useful insight into various thermal phenomena. The work is founded on classical molecular dynamics simulations and quantum-mechanical Green's function approaches, both using the fluctuation-dissipation theorem to couple the studied systems to external heat baths. To enable detailed analysis of energy transfer mechanisms in thermal conduction, new methods to spectrally decompose the lattice heat current into frequency components are also developed. Spectral analysis is applied in the thesis to identify non-linear energy transfer mechanisms at material interfaces and to determine the mean free paths of heat carriers in carbon nanotubes. The results also suggest that the thermoelectric efficiency of silicon nanowires can be increased by a specific superlattice structure and that the electromagnetic energy transfer rate between dielectric nanoparticles can be tuned by a mirror cavity.

In addition, the thesis initiates the development of a unified fluctuational model for describing energy transfer by lattice vibrations, electromagnetic fields, and electrons in a single mathematical framework that can generate extensive understanding of the energy conversion phenomena present in small structures. As a whole, the methods and results of the thesis provide new analytical and numerical tools for describing nanoscale energy transfer within a framework that may, with further development, become instrumental also in modeling energy conversion and transfer processes in multiscale systems involving heat, light and electricity.

**Keywords** Heat transfer, molecular dynamics, phonons

**ISBN (printed)** 000-000-00-0000-0

**ISBN (pdf)** 000-000-00-0000-0

**ISSN-L** 1799-4934

**ISSN (printed)** 1799-4934

**ISSN (pdf)** 1799-4942

**Location of publisher** Helsinki

**Location of printing** Helsinki

**Year** 2015

**Pages** 169

**urn** <http://urn.fi/URN:ISBN:000-000-00-0000-0>



**Tekijä**

Kimmo Säaskilahti

**Väitöskirjan nimi**

Nanomittakaavan energiansiirron laskennallinen mallinnus ja taajuusanalyysi

**Julkaisija** Perustieteiden korkeakoulu**Yksikkö** Neurotieteen ja lääketieteellisen tekniikan laitos**Sarja** Aalto University publication series DOCTORAL DISSERTATIONS 0/2015**Tutkimusala** Laskennallinen tiede**Käsitteilyajon pvm** 03.09.2015**Väitöspäivä** XX.XX.XXXX**Julkaisuluvan myöntämispäivä** XX.XX.XXXX**Kieli** Englanti☐ **Monografia**☒ **Yhdistelmäväitöskirja (yhteenvedo-osa + erillisartikkelit)****Tiivistelmä**

Nanoteknologian nopea kehitys on synnyttänyt uusia tapoja hallita lämpöenergiaa. Lämpöenergian tehokkaan hallinnan ja ohjauksen odotetaan mahdollistavan mm. puhtaan energiantuotannon termosähköisillä materiaaleilla, digitaalielektroniikan tehonkulutuksen pienentämisen sekä täysin uusien sovellusten kuten lämpöohjatun magneettisen tallentamisen kehittämisen. Lämpöenergiaa hyödyntävien sovellusten kehittäminen vaatii kuitenkin erinomaista ymmärrystä energiansiirtomekanismeista hyvin pienissä rakenteissa.

Väitöskirjatyön tavoitteena on kehittää uusia laskennallisia malleja ja menetelmiä lämmönsiirron mallintamiseen nanomittakaavan rakenteissa sekä soveltaa menetelmiä uuden ymmärryksen synnyttämiseen. Työ perustuu klassiseen epätasapainotilan molekyyliydynamiikkamenetelmään sekä kvanttiteoriaa tarkasteltavan systeemin ja ympäristön välisen kytkennän kuvaamiseen. Lämmönjohtumismekanismien analysoimiseksi kehitetään mm. menetelmä hilavärähtelyjen kuljettaman lämpövirran jakamiseksi taajuuskomponentteihin. Työn malleja ja spektraalista hajotelmaa sovelletaan epälineaaristen lämmönsiirtomekanismien tunnistamiseen materiaalarajapinnoilla sekä lämpöä kuljettavien hilavärähtelyjen vapaiden matkojen määrittämiseen hiilinanoputkissa. Työn tulokset osoittavat myös, että piinanolankojen termosähköisiä ominaisuuksia voidaan parantaa erityisellä superhilarakenteella ja että sähkömagneettisen lämmönsiirron voimakkuutta nanopartikkeleiden välillä voidaan muokata sijoittamalla partikkelit peilikaviteettiin.

Työssä kehitetään lisäksi yhtenäinen matemaattinen malli hilavärähtelyjen, sähkömagneettisten kenttien ja elektronien lämmönkuljetuksen mallintamiseen. Kokonaisuudessaan väitöskirjatyö tarjoaa energiansiirron mallintamiseen työkaluja, jotka voivat tulevaisuudessa olla merkittävässä roolissa valon, sähköön ja lämmön vuorovaikutuksien kuvaamisessa eri mittakaavan rakenteissa.

**Avainsanat** Lämmönsiirto, molekyyliydynamiikka, fononit**ISBN (painettu)** 000-000-00-0000-0**ISBN (pdf)** 000-000-00-0000-0**ISSN-L** 1799-4934**ISSN (painettu)** 1799-4934**ISSN (pdf)** 1799-4942**Julkaisupaikka** Helsinki**Painopaikka** Helsinki**Vuosi** 2015**Sivumäärä** 169**urn** <http://urn.fi/URN:ISBN:000-000-00-0000-0>

