

第八届全国热传导研讨会

THE 8th WORKSHOP ON THERMAL TRANSPORT

纳米线热物理性质的理论模型

Theoretical Model of Thermophysical Properties of Nanowires

刘世贤



莫斯科鲍曼国立技术大学 热物理教研室

BAUMAN MOSCOW STATE TECHNICAL UNIVERSITY



2024年7月25日 · 兰州



纲要

CONTENTS

➤➤➤

- 1、课题组介绍
- 2、研究背景
- 3、研究方法
- 4、结果与讨论
- 5、总结



01

课题组介绍

- 课题组成员
- 课题组研究方向



■ 课题组成员

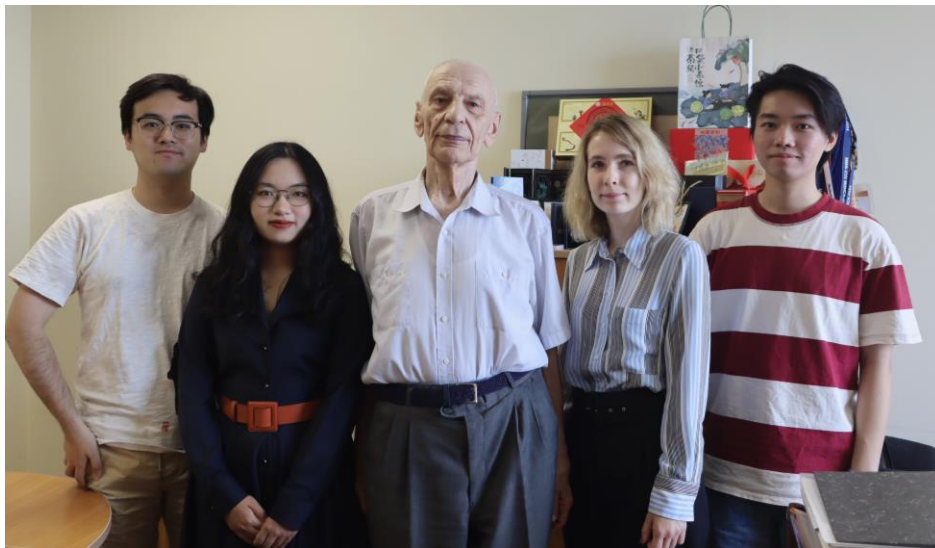
课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



(1940 -)

导师：Khvesyuk Vladimir Ivanovich

■ 已毕业博士：

刘彬 (2018-2022) (清华博后, 导师王沫然教授)

乔文沛 (2018-2022) (隆基绿能, 总工程师)

■ 在读学生：

博士：刘世贤 (2023 -) , 闫菲 (2024 -)

硕士：张戈 (2023 -)



■ 课题组研究方向

在纳米尺度热物理性质问题的数学统计模型

课题组介绍

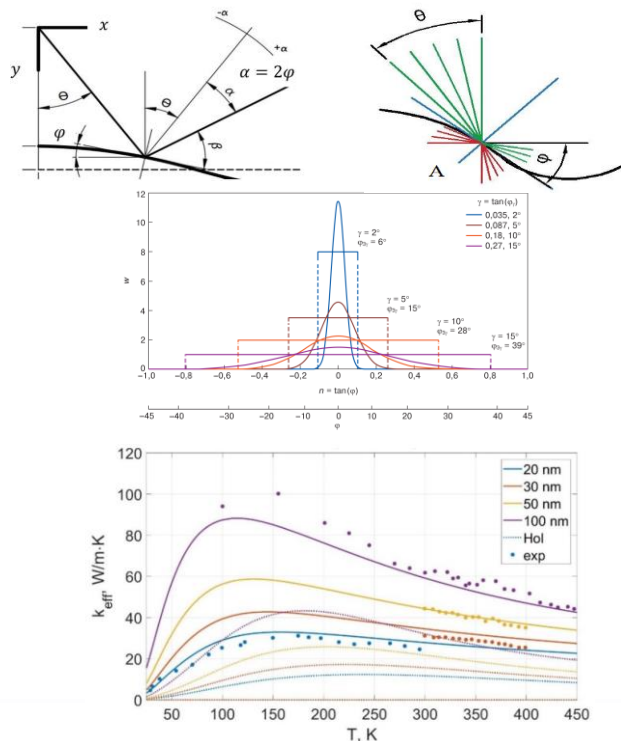
研究背景

研究方法

结果与讨论

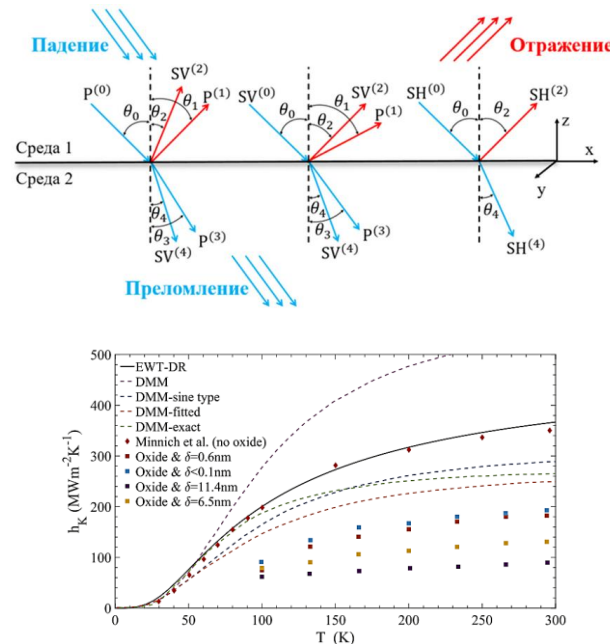
总结

薄膜中声子与粗糙边界散射的统计模型



Наука и Образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана **06** (2017).

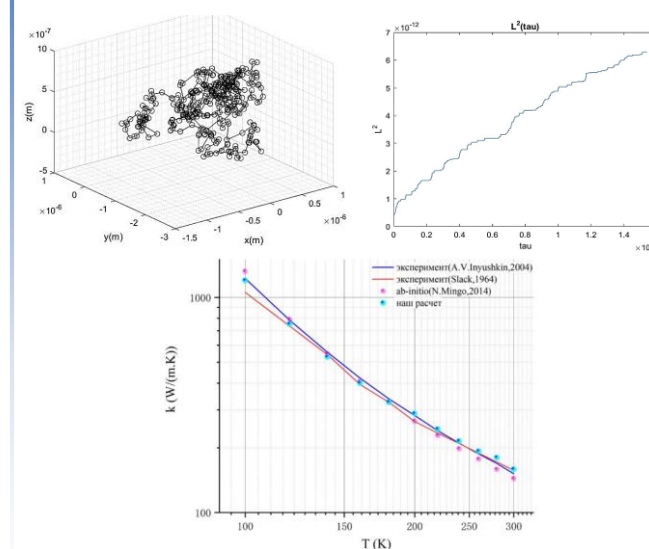
界面热阻和多层结构热传输的计算模型



Int. J. Heat Mass Tran. **159** (2020).
Int. J. Mech. Sci. **218** (2022).
Nano Res. **15** (2022).

蒙特卡洛模拟声子热导率的数学模型

$$\langle L^2 \rangle = 2D(T)t$$
$$k(T) = C(T)D(T)$$



Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки **3** (2022).



02

研究背景

- SiNW 有哪些应用？
- SiNW 热导率实验测量结果
- SiNW 热导率理论模拟结果



■ SiNW 有哪些应用？

课题组介绍

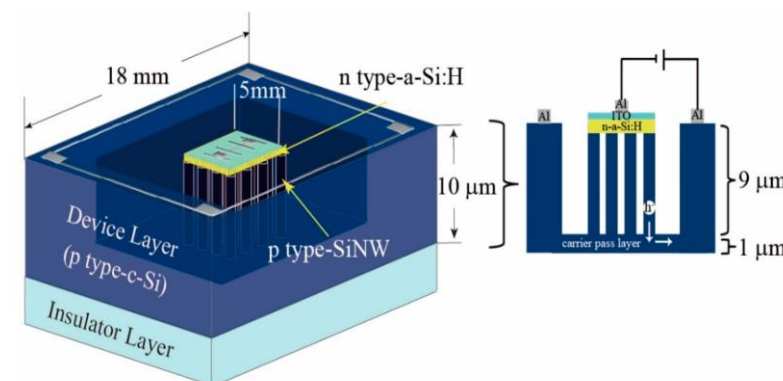
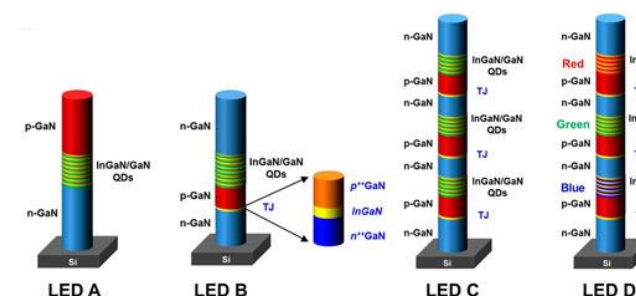
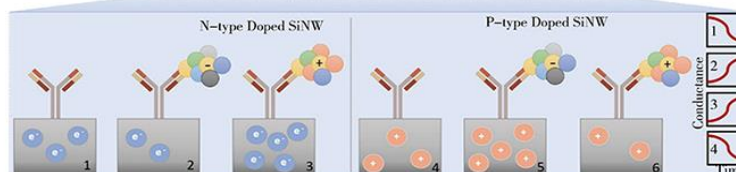
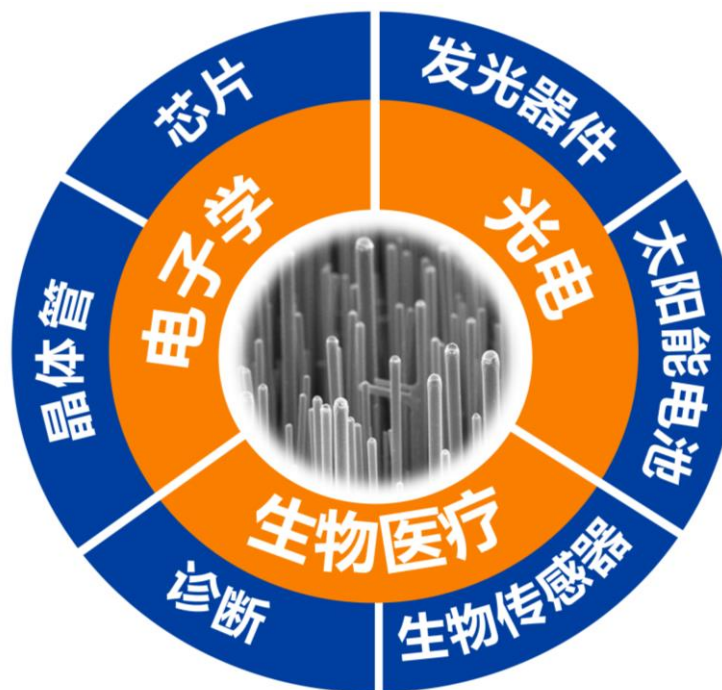
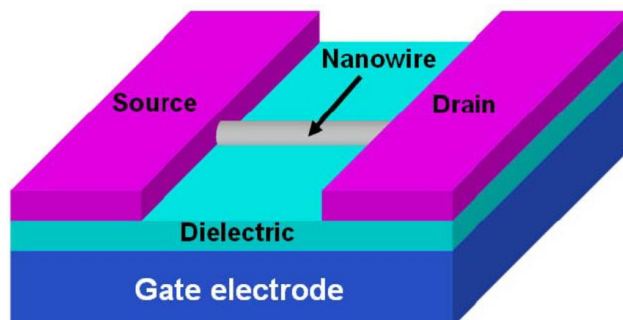
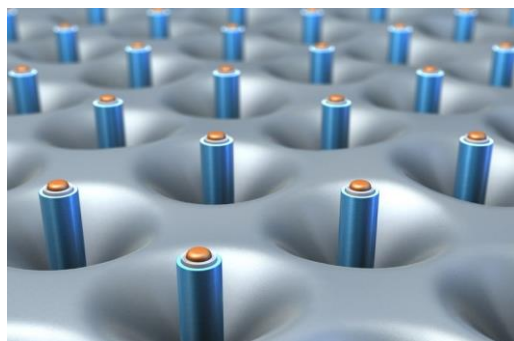
研究背景

研究方法

结果与讨论

结论

硅纳米线 SiNW





■ SiNW 热导率实验测量结果

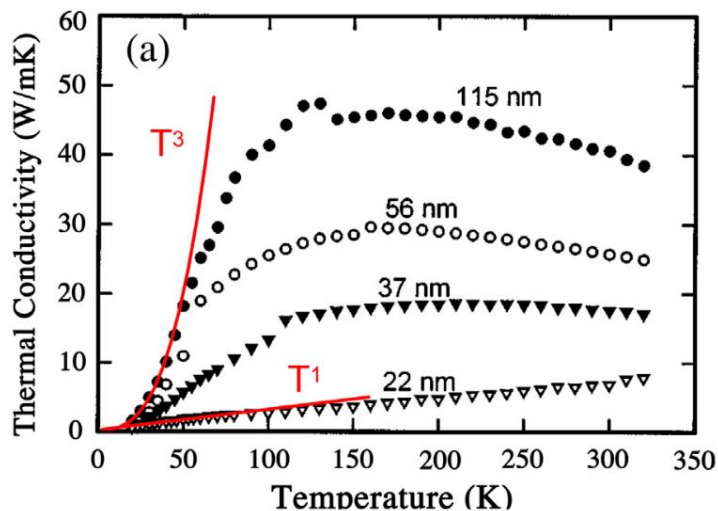
课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

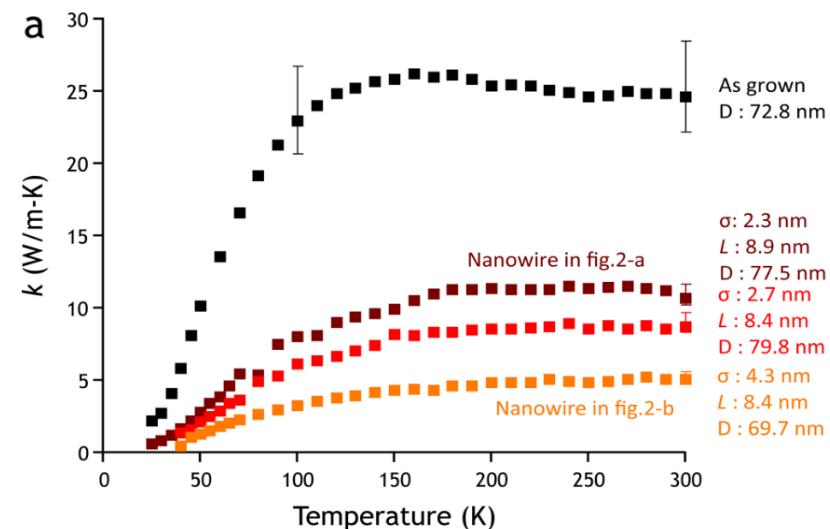
总结



- SiNW 热导率远低于体块硅
- SiNW 直径越小，其热导率越低
- 对于22nm直径的 SiNW，热导率线性增长

[Li et al. 2003 Appl. Phys. Lett. 83 2934](#)

- SiNW 表面越粗糙，其热导率越低
- SiNW 粗糙度的影响大于直径的影响

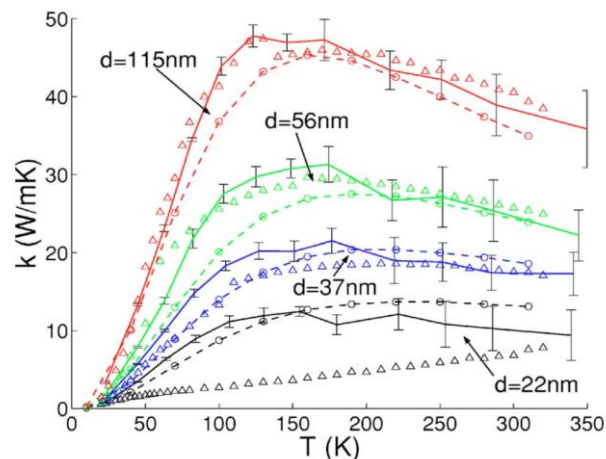


[Lim et al. 2012 Nano Lett. 12 2475](#)



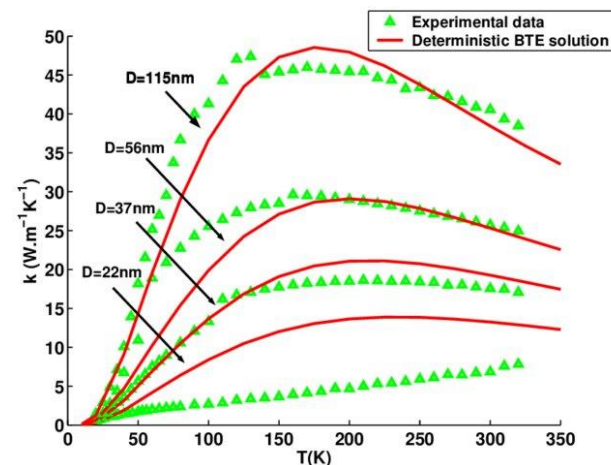
■ SiNW 热导率理论模拟结果

□ 声子蒙特卡洛模拟



Lacroix D. et al. 2006 *Applied Physics Letters* **89** 103104.

□ 数值求解 BTE



Terris D. et al. 2007 *Journal of Physics: Conference Series* **92** 012077

为什么直径为22nm的结果与实验不吻合？

课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



03

研究方法

- 三个重要的现象需要讨论
- 弹性圆棒中三种模式的导波
- 圆棒内弹性波色散关系
- 圆棒内声子修正色散关系与群速度
- 关于处理边界散射的讨论



■ 三个重要的现象需要讨论

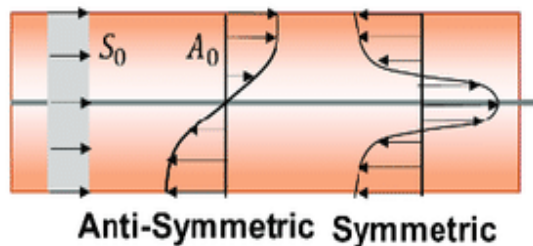
课题组介绍

研究背景

研究方法

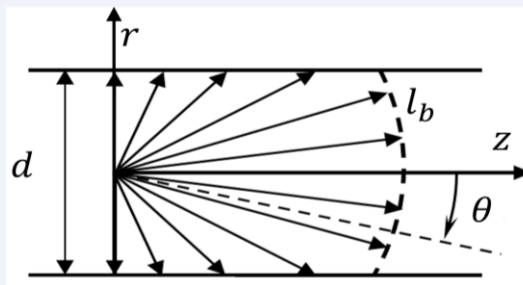
结果与讨论

总结



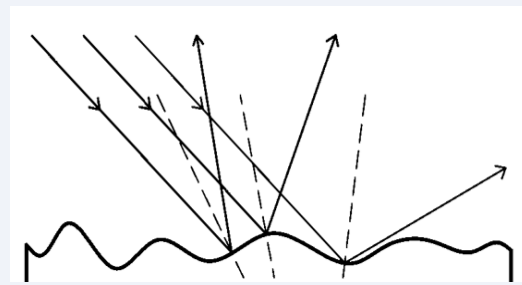
量子尺寸效应

$d \sim \lambda$ 时, 声子在径向方向上会受到量子约束。(能级离散化)
声子色散关系需要被修正。



经典尺寸效应

$d \leq l_{bulk}$ 时, 边界散射对热导率具有决定性影响



表面粗糙度的影响

表面粗糙度增加了声子在边界上的散射概率, 降低热导率



■ 弹性圆棒中三种模式的导波

课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结

扭转波 (Torsional wave)

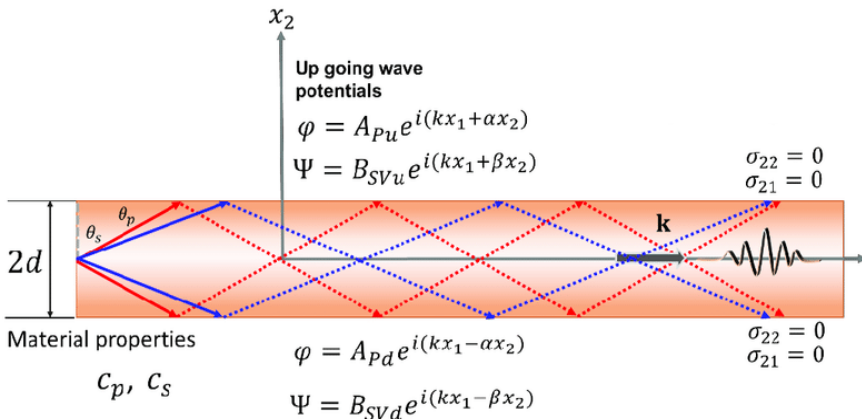
$$\beta \cdot J_0(\beta) - 2J_1(\beta) = 0$$

纵波 (Longitudinal wave)

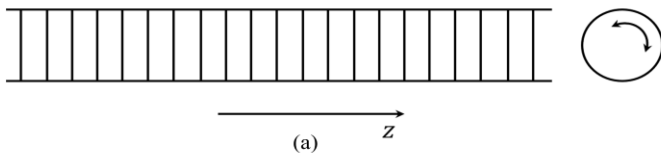
$$(\xi^2 - \beta^2)^2 \frac{\alpha J_0(\alpha)}{J_1(\alpha)} + 4\xi^2 \alpha^2 \frac{\beta J_0(\beta)}{J_1(\beta)} = 2\alpha^2(\xi^2 + \beta^2)$$

弯曲波 (Flexural wave)

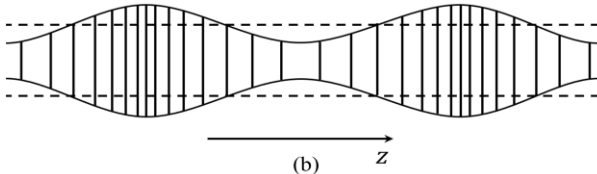
$$J_1(\alpha)J_1^2(\beta) \begin{vmatrix} \xi^2 - \beta^2 + 4 - 2\Psi_\alpha & 2\xi(\beta^2 - 2 + \Psi_\beta) & 2\Psi_\beta - 4 \\ 4 - 2\Psi_\alpha & 2\xi(\Psi_\beta - 2) & \beta^2 - 4 + 2\Psi_\beta \\ 2\xi(\Psi_\alpha - 1) & (\beta^2 - \xi^2)(\Psi_\beta - 1) & \xi \end{vmatrix} = 0$$



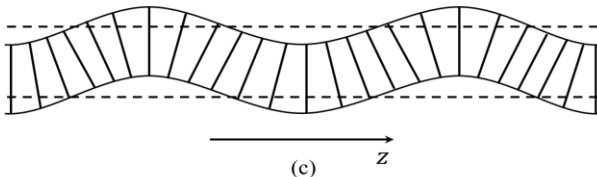
T wave



L wave



F wave





■ 圆棒内弹性波色散关系

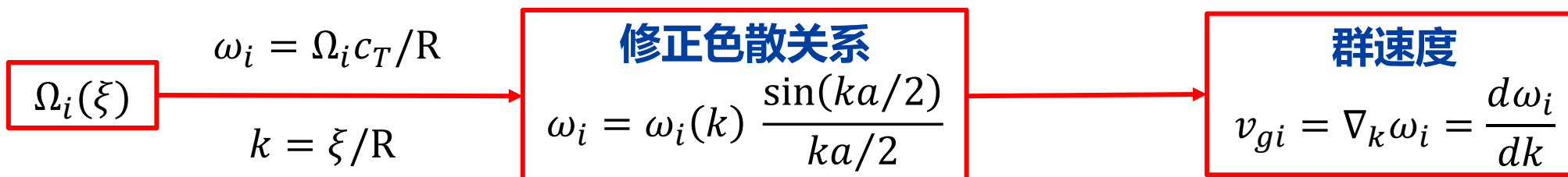
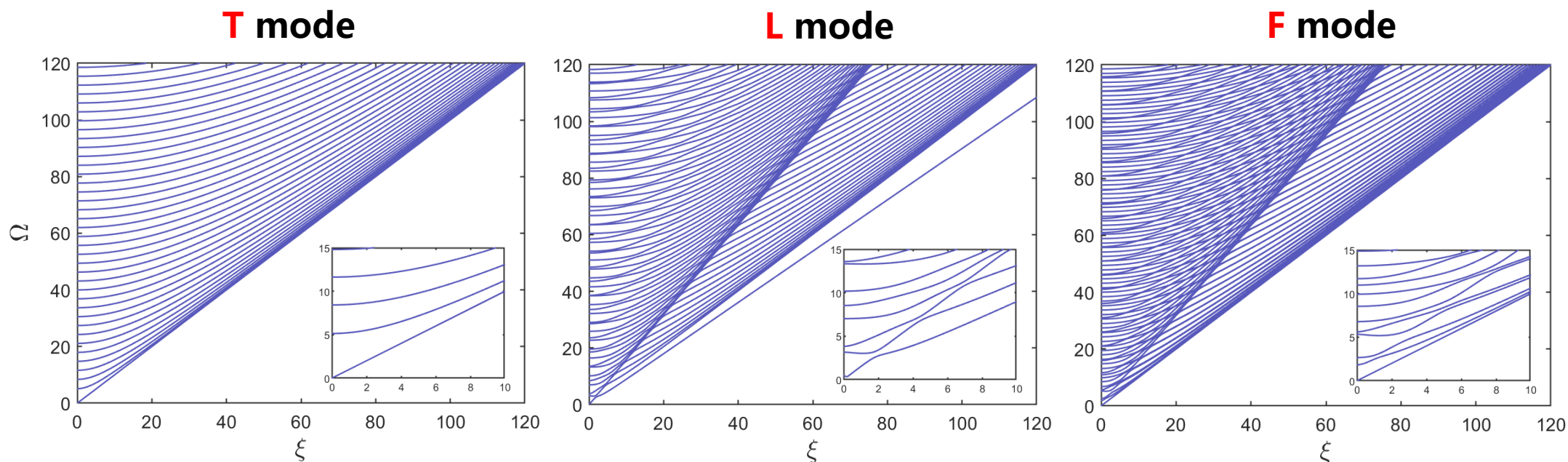
课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



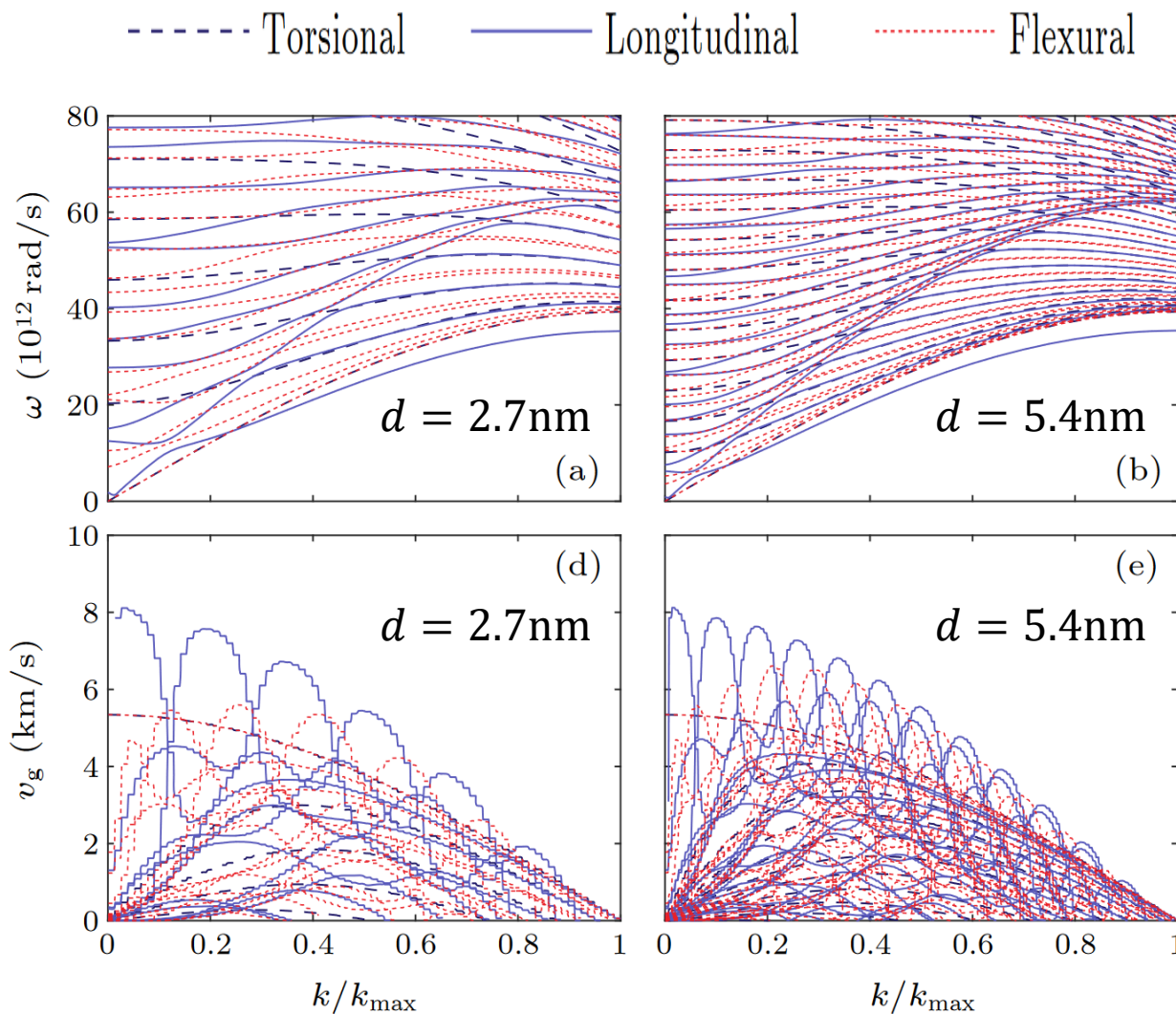
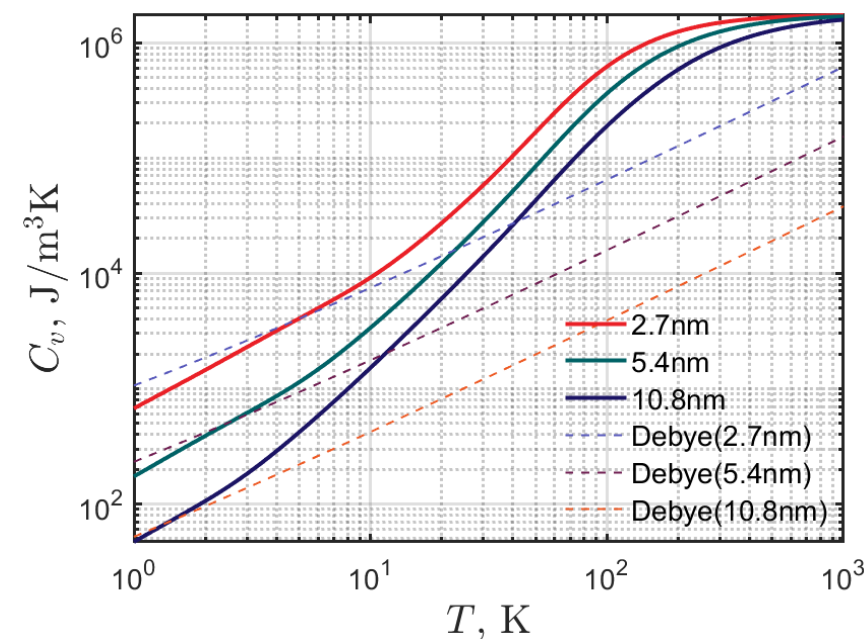


圆棒内声子修正色散关系与群速度

量子尺寸效应

声子比热容在低温下接近一维德拜模型

$$C_{1D} \approx \frac{1.736T^{\frac{1}{2}}}{\pi} \sqrt{2k_B^3/\hbar c_0 R}$$



课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



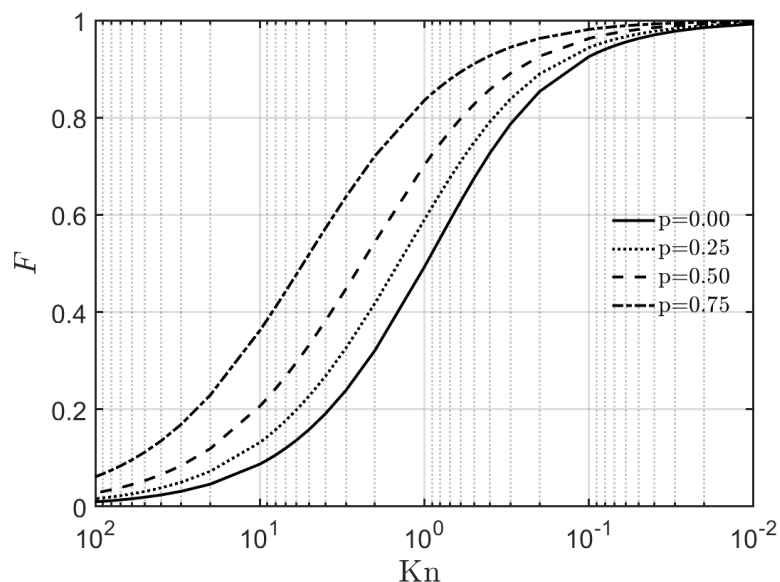
■ 关于处理边界散射的讨论

经典尺寸效应

$$F(Kn, p) = \frac{l_{\text{wire}}}{l_{\text{bulk}}} = 1 - \frac{12(1-p)^2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} mp^{m-1} G(Kn, m)$$

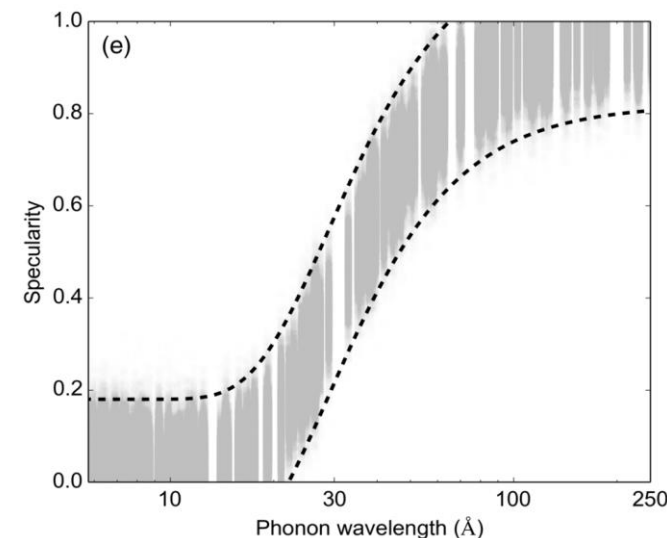
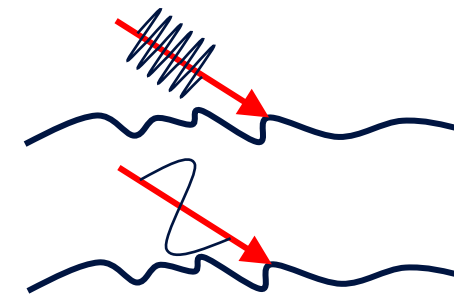
$$G(Kn, m) = \int_0^1 \sqrt{1-\xi^2} \int_1^{\infty} \exp\left(-\frac{m\xi t}{Kn}\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^4} dt d\xi$$

[Zhang Z.M. Nano/Microscale Heat Transfer, 2020.](#)



表面粗糙度的波相关性

$$p(\vec{k}, \sigma, \theta) = \exp(-4k^2 \sigma^2 \cos^2 \theta)$$



[Ravichandran N. K. et al 2018
Physical Review X, 8\(4\), 041004.](#)

课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



04

结果与讨论

- 计算结果与实验的对比



■ 计算结果与实验的对比

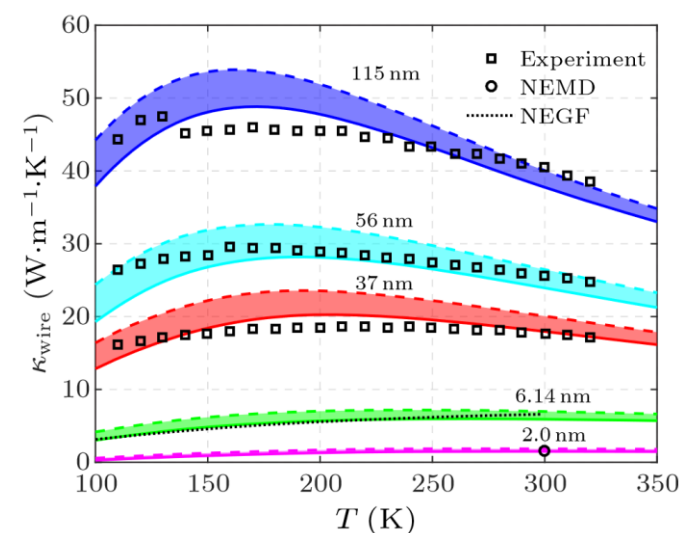
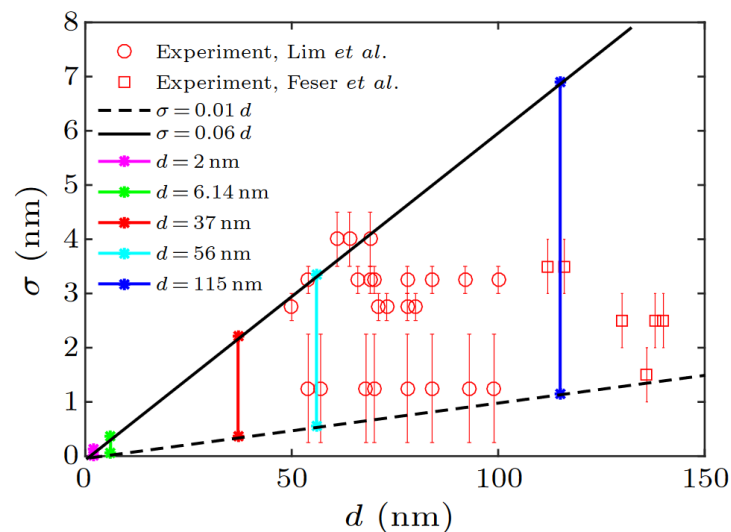
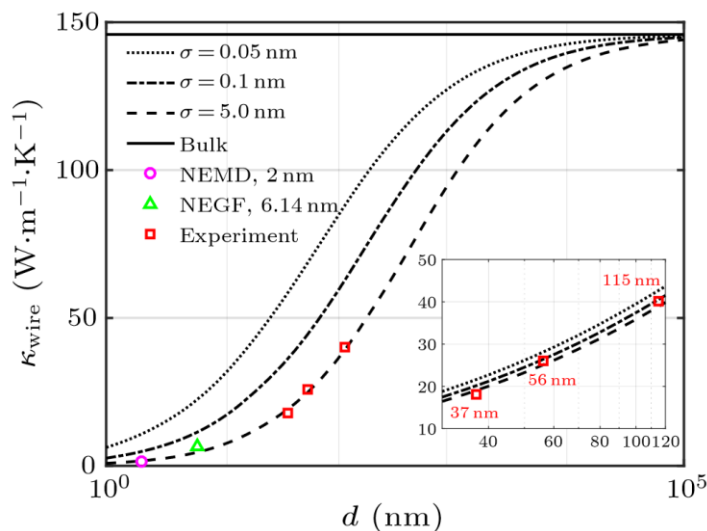
课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结



- 直径小于 10nm SiNW，需要考虑量子尺寸效应
- 直径大于 30nm SiNW，直接使用体块硅的色散关系
- SiNW 热导率随直径增大而收敛于体块热导率
- 根据实验数据，表面粗糙度 σ 设置为一个范围 $0.01d < \sigma < 0.06d$
- 直径为 22nm 的纳米线，无论使用哪种色散关系，都与实验不吻合



05

总结



■ 结论总结

课题组介绍

研究背景

研究方法

结果与讨论

总结

01

基于弹性波理论**数值求解**了纳米线的**声子色散关系**

02

直径小于 **10 nm** 的纳米线，其量子尺寸效应在**低温下**很重要

03

可以根据**温度、直径和表面形态**评估和预测纳米丝的导热率

04

通过与实验数据对比验证了数学模型的正确性

第八届全国热传导研讨会

THE 8th WORKSHOP ON THERMAL TRANSPORT

谢谢大家，恳请各位老师批评指正！



公众号：振振有声子