МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ БЕЗДЕФЕКТНЫХ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ОТ ИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И ТЕМПЕРАТУРЫ

А. Г. Проневский, М. С. Тиванов

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки (УНТ) благодаря их хорошей электро- и теплопроводности, а также высокой химической, термической и механической стабильности рассматриваются как один из наиболее перспективных объектов наноэлектроники [1-5].

Несмотря на огромный потенциал применения в наноэлектронике УНТ в составе теплоотводящих устройств, известные модели по расчету их коэффициента теплопроводности дают различные результаты, измеренное значение коэффициента теплопроводности также может варьироваться в пределах нескольких порядков величины [6]. Поэтому задача построения корректных моделей теплопроводности УНТ имеет важное значение.

МОДЕЛЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ БЕЗДЕФЕКТНЫХ УНТ

Будем считать однослойную УНТ 2D объектом. Тогда, согласно [7] для однослойной УНТ справедлив закон Фурье в двумерной форме, в котором коэффициент теплопроводности имеет размерность $\hat{A}\grave{o}/\hat{E}$.

Из элементарной теории переноса следует, что коэффициент двумерной теплопроводности можно представить в виде [7]:

$$\kappa = \frac{1}{2}\rho\upsilon c_V L_B = \frac{1}{2s_2}\frac{C_2}{\mu}\upsilon^2\tau_B, \tag{1}$$

где υ – скорость фононов – суть групповая, т.к. связана непосредственно с переносом энергии; ρ – двумерная плотность материала; L_B – длина баллистичности – длина свободного пробега фонона; τ_B – время релаксации – время между столкновениями; c_V – удельная теплоемкость; C_2– молярная двумерная теплоемкость; $\mu = 12\, \tilde{a}/\grave{i}\,\hat{i}\,\ddot{e}\ddot{u}$ – молярная (атомная) масса углерода; $s_2 = \rho^{-1} = 2,63\times10^6\ \grave{i}^{\,2}/\hat{e}\tilde{a}$ – удельная поверхность.

Таким образом, для определения коэффициента двумерной теплопроводности УНТ необходимо найти выражения для теплоемкости, групповой скорости и времени релаксации.

Для нахождения теплоемкости воспользуемся общеизвестной моделью Дебая, рассматривающей только акустические длинноволновые фононы, т.е. фононы с линейным законом дисперсии. Но, т.к. рассматриваемый объект наноразмерный, то нижняя граница интегрирования по частоте отлична от нуля [8]. Введя такое предположение, мы получаем формулу для теплоемкости, схожую с [8], но отличающейся от приведенной учетом длины УНТ:

$$C_2(\mathrm{T},\mathrm{L}) = \left[4R \big/ \Theta_D^2 - \Theta_{\min}^2 \right] \left\{ 3T^2 \int\limits_{\Theta_{\min}/T}^{\Theta_D/T} \frac{z^2 dz}{\exp[\mathrm{z}]-1} + \frac{1}{T}\frac{\Theta_{\min}^3}{\exp[\Theta_{\min}/T]-1} - \frac{1}{T}\frac{\Theta_D^3}{\exp[\Theta_D/T]-1} \right\}, \tag{2}$$

где $\Theta_{\min} = h\upsilon \big/ 2Lk_B$ - введенная по аналогии с Θ_D (температурой Дебая) «минимальная» температура, соответствующая минимальной частоте фононов. Температура Дебая, в свою очередь, также начинает зависеть от длины УНТ через отношение числа атомов на единице длины структуры, которое различно для УНТ типа «зигзаг» и «кресло». Так для УНТ типа «зигзаг» имеем $N \big/ L_{\text{çèãçàã}} = 38\sqrt{3}\pi d \big/ 87a^2$, а для типа «кресло» – $N \big/ L_{\text{êðåñëî}} = 4\sqrt{3}\pi d \big/ 9a^2$ (d - диаметр, a – расстояние между ближайшими атомами в ячейке графена).

При комнатных и более низких температурах в графене и УНТ концентрация свободных носителей заряда мала и электрон-фононным рассеянием можно пренебречь по сравнению с фонон-фононным рассеянием и рассеянием на дефектах [9, 10]. Поскольку в нашем случае объектом исследования являются бездефектные однослойные УНТ, то τ_B определяется фонон-фононным рассеянием.

Для времени рассеяния длинноволнового фонона в U-процессах с учетом трехфононного рассеяния второго порядка, Клеменсом, методами теории возмущений, было получено следующее выражение [11, 12]:

$$\frac{1}{\tau_B(\omega)} \cong \gamma^2 \frac{k_B T}{M\upsilon^2}\left[2\frac{\omega^2}{\omega_D} + \gamma^2 \frac{k_B T}{M\upsilon^2}\omega_D \right], \tag{3}$$

где γ – параметр Грюнайзена, $M = 4\times10^{-26}\,\text{êã}$– масса ячейки.

В качестве параметра Грюнайзена будем использовать значение $\gamma = 1,24$, полученное в работе [13].

В качестве групповой скорость будем приближено использовать усредненные по Дебаю скорости продольной ($v_L = 37,4\times10^3\ \text{ì}\big/\tilde{n}$) и поперечной ($v_T = 29,5\times10^3\ \text{ì}\big/\tilde{n}$) звуковых волн, найденные в работе для графена [14]:

$$\upsilon = \left(2\left(\frac{1}{v_L^2} + \frac{1}{v_T^2} \right)^{-1} \right)^{1/2} \square\, 16,2\times 10^3\, \text{ì}/\text{ñ}, \tag{4}$$

Используя формулу (1) и полученные выражения для теплоемкости, скорости, времени релаксации можно получить зависимости для теплопроводности УНТ от ее температуры (Рис.1) и длины (Рис.2).

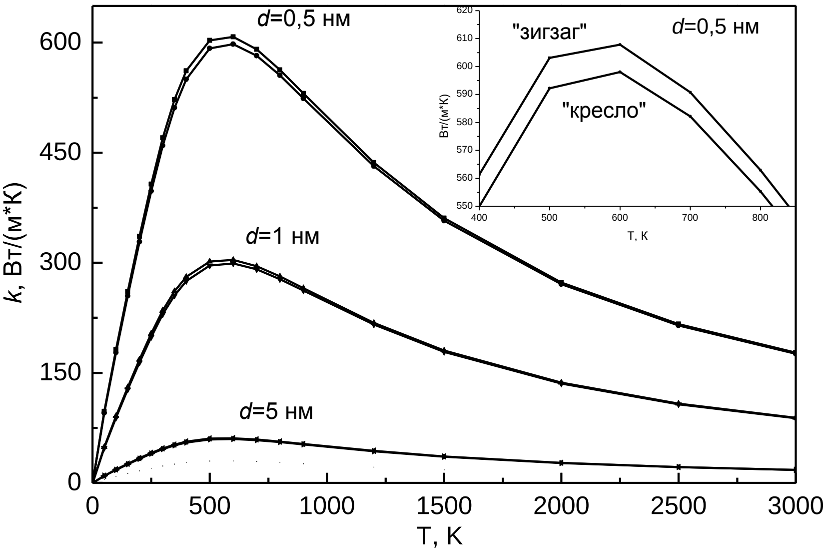

Рис. 1. Зависимости теплопроводности УНТ длиной 100 нм от температуры при конкретных диаметрах d

Как видно из *Рис.*1, при увеличении диаметра УНТ ее теплопроводность уменьшается в рамках данной модели. Наличие же пика — следствие того, что при увеличении температуры увеличивается число фононов, т.е. теплопроводность возрастает, однако одновременно с этим увеличивается интенсивность фонон-фононного рассеяния, что уменьшает коэффициент теплопроводности.

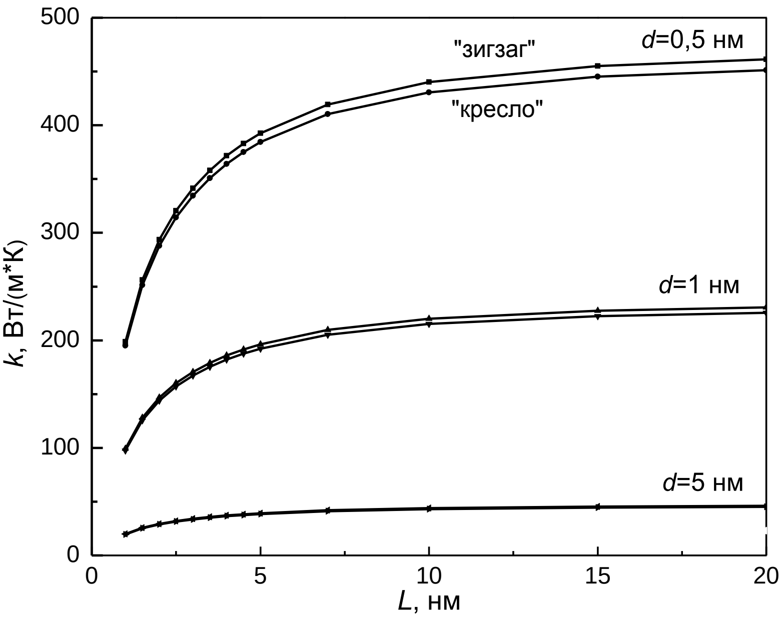

*Рис.*2. Зависимости теплопроводности УНТ от длины при температуре 300 К и конкретных диаметрах

Как следует из *Рис.*2, при увеличении длины однослойной УНТ значение теплопроводности выходит на насыщение.

Из *Рис.*1 и *Рис.*2 также следует, что хиральность (в данном случае «зигзаг» и «кресло») однослойных УНТ фактически не сказывается на значении теплопроводности при любых длинах и диаметрах УНТ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана модель теплопроводности бездефектных однослойных УНТ, основанная на известной модели теплоемкости Дебая и кинетической модели фононного теплопереноса, отличающаяся учетом длины УНТ путем уточнения модели Дебая и вклада фонон-фононного рассеяния в на основании формулы Клеменса. Показаны незначительные отличия между значениями теплопроводности для бездефектных однослойных УНТ для различных хиральностей («зигзаг», «кресло»). Установлены зависимости коэффициента теплопроводности бездефектных однослойных УНТ от их длины и температуры при конкретных диаметрах.

Литература

1. *Елецкий А.В.,* Транспортные свойства углеродных нанотрубок / Елецкий А.В. – УФН. – 2009. – V. 16 – P. 225-241
2. *Елецкий А.В.* Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства / Елецкий А.В. – УФН. – 2002. – V.35 – P. 401-436

3. *Dresselhaus M S, Eklund P C, Dresselhaus G,* Science of fullerens and carbon nanotubes (San Diego: Academic Press, 1996)
4. *Saito R, Dresselhaus M S, Dresselhaus G,* Physical properties of carbon nanotubes (London: Imperial Colledge Press, 1998)
5. *Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Avouris P,* Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties and applications (Berlin: Springer, 2001)
6. *Balandin A.* Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials, Nature Materials 10, pp.569-581, 2011
7. *Браже Р.А., Нефедов В.С.,* Теплопроводность углеродных супракристаллических нанотрубок / Браже Р.А., Нефедов В.С. – ФТТ. – 2012. – V. 3 – P. 1435-1438
8. *Кузнецов В.М., Хромов В.И.,* Фрактальное представление теории Дебая для исследования теплоемкости макро- и наноструктур, ЖТФ, том 78, вып. 11, 2008
9. *Завальнюк В.В.,* Колебательные возбуждения в графене и углеродных нанотрубках с точечными дефектами: дис. канд. физ.-мат. наук: 01.04.02: защищена 21.12.2012. – Одесса, 2012. – 120 с.
10. *Ziman J. M* , 1960 Electrons and phonons. The Theory of Transport Phenomena in Solids / Ziman J.M. – Oxford: Clarendon Press, 1960
11. *Ecsedy D J, Klemens P G,* Phys. Rev. B 15 5957 (1997)
12. *Klemens P G, Pedraza D F,* Carbon 32 735 (1994)
13. *Reich S., Jantoljak H. and Thomsen C.,* Phys. Rev. B, 61, R13389 (2000)
14. *Nika D L, Balandin A.A.* Ph,onon transport in graphene (2012)

АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМОВ ТЕПЛОВОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С НЕЛИНЕЙНЫМИ КОГЕРЕНТНЫМИ ПОТЕРЯМИ ДЛЯ СТАБИЛИЗАЦИИ ГЕНЕРАЦИИ НЕКЛАССИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ

А. А. Сакович

ВВЕДЕНИЕ

Одним из способов устойчивого создания неклассических состояний в оптических системах является применение искусственно созданной диссипации. В работе [1] был рассмотрен один из возможных случаев – нелинейные когерентные потери (НКП). Было показано, что в системах с НКП возможно создание таких существенно неклассических состояний, как фоковские с произвольно высокой точностью. Однако в реальных системах НКП, как правило, сопровождаются дополнительными потерями: например, линейными потерями. В работе [2] была изучена эволюция системы, подверженной НКП вместе с линейными потерями или тепловым возбуждением. Было отмечено, что линейные потери приводят систему в вакуумное состояние, тогда как тепловое возбуждение приводит к устойчивой генерации неклассических состояний.