ترابرد گرما از طریق نانوسیم سیلیکون

عزیزه آقابابایی[1*]

[1] گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

اطلاعات مقاله

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۰/۲۷
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۰/۱
تاریخ چاپ: ۱۴۰۳/۱۰/۱۱

شاپای چاپی: 2588-493x
شاپای الکترونیکی: 2588-4921

* نویسنده مسئول
a.aghababaei94@gmail.com

چکیده

نانوسیم سیلیکون به دلیل خواص الکتریکی، مکانیکی و کاربردهای بالقوه آن در بسیاری از زمینه‌ها از قبیل بیوسنسورها، در سال‌های اخیر توانسته توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کند. ما در این پژوهش ترابرد فونون از طریق نانو سیم سیلیکون را، در حضور ناخالصی ایزوتوپ به صورت نظری مورد بررسی قرار دادیم. خواص ترابرد گرمایی نانو سیم سیلیکون در جهت <۱۰۰> ، با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی مطالعه شد و اتم‌های ناخالصی، در قسمت میانی ساختار قرار گرفتند.

نتایج این تحقیق نشان داد که در حضور ناخالصی ایزوتوپ، رسانندگی گرمایی کاهش می یابد. هم‌چنین اثر جرم اتم ناخالصی نیز مورد بررسی قرار گرفت و نتایج این مطالعه نیز، بیانگر این مطلب بود که، با افزایش جرم اتم ناخالصی، رسانندگی گرمایی کاهش بیش‌تری می‌یابد؛ که علت آن را می‌بایست در وابستگی فرکانس فونون به جرم بررسی کرد.

واژه‌های کلیدی: نانو سیم سیلیکون، ناخالصی، ترابرد فونون، رسانندگی گرمایی

مقدمه

پیشرفت‌های چشم‌گیر فناوری نانو از دهه گذشته تا به امروز، حاکی از اهمیت فناوری نانو در طراحی قطعات گرمایی است. کوچک شدن ابعاد قطعات و حضور چشم‌گیر اثرات فونونی در اندازه‌های نانو، دانشمندان را به مطالعه ترابرد گرما در قطعات نانو مقیاس تشویق کرده است. پیش‌بینی می‌شود که نانو ساختارها به علت دارا بودن نسبت بالای سطح به حجم، ویژگی‌های منحصر به فردی از خواص الکترونیکی، اپتیکی، مکانیکی و مغناطیسی نمایش دهند. یک مشکل بزرگ با کاهش پیشرونده مقیاس دستگاه‌های الکترونیکی این است که گرمای زیادی در منطقه کوچکی تولید می‌کنند، که باعث مختل شدن عملکرد و کارایی قطعه می‌شوند [۱]. بنابراین در طراحی دستگاه‌های الکترونیکی، چگونگی حذف و یا کاهش تولید گرما باید مورد توجه قرار گیرد. دستگاه‌های ترموالکتریک قادر هستند نقاط داغ را از بین ببرند و گرما را به الکتریسته مورد استفاده تبدیل کنند. نانوسیم‌های سیلیکون به خاطر سازگاری ایده‌آل با فناوری مبتنی بر سیلیکون انتخاب خوبی برای مواد ترموالکتریک می‌باشند [۱]؛ و همچنین به علت نسبت بالای سطح به حجم نسبت به سیلیکون، طیف گسترده‌ای از کاربردها در جهان امروز دارد؛ و به عنوان حسگرهای بیولوژیکی، شمیایی و همچنین ترانزیستورهای الکترونیکی و ساخت قطعات الکترونیکی کوچک استفاده می‌شوند [۲]. نانوسیم سیلیکون یک ماده مناسب برای دستگاه‌های ترموالکتریک می‌باشد. دستگاه‌های ترموالکتریک کارامد نیاز به یک ماده با ضریب بهره‌وری بالا دارند. ضریب بهره‌وری

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]

آن‌ها که نماد راندمان قطعه است به صورت $(ZT = S^2\sigma T/K)$ می‌باشد؛ که S ضریب سیبک، σ رسانندگی الکتریکی، T دمای مطلق و K رسانندگی گرمایی کل است [۳]. ضریب بهره‌وری در کاربردهای ترموالکتریک باید بزرگتر از واحد باشد. سیلیکون کپه‌ای به عنوان یک ماده ترموالکتریک نامرغوب شناخته شده است و مقدار ضریب بهره‌وری آن حدود ۰/۰۱ در دمای اتاق (۳۰۰ کلوین) است [۴]؛ در حالی که نانوسیم سیلیکون ضریب بهره‌وری نزدیک به واحد در ۲۰۰کلوین دارد [۵]. این بهبود خوب در ضریب بهره‌وری از کاهش در رسانندگی گرمایی فونون به وجود می‌آید، که به علت پراکندگی فونون می‌باشد.

۱- روش محاسبه

در این مقاله، ساختار مدل به صورت منبع گرمایی راست/ نانوسیم سیلیکون/ منبع گرمایی چپ در نظر گرفته شد. و با در نظر گرفتن منابع گرمایی به صورت زنجیره¬های یک بعدی نیمه نامحدود، هامیلتونی سامانه را به صورت زیر بررسی کردیم:

در دمای اتاق ضریب بهره‌وری نانوسیم سیلیکون حدود ۰/۵ است [۶ و ۵]. بنابراین هم‌چنان نیاز است که ضریب بهره‌وری را دوباره افزایش دهیم تا از نانو سیم سیلیکون در ساخت وسایل ترموالکتریک استفاده شود؛ که برای انجام این کار نیاز به کاهش رسانندگی گرمایی است. یکی از روش‌های موثر برای کاهش رسانندگی گرمایی استفاده از ناخالصی ایزوتوپ است؛ که برخی از اتم‌های یک ماده با ایزوتوپ‌های آن ماده با جرم متفاوت جایگزین می‌شوند. این کاهش به صورت تجربی در سیلیکون کپه‌ای و گرافن تایید شده است [۸ و ۷]. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی ابتدا خواص ترابرد گرمایی نانوسیم سیلیکون در غیاب ناخالصی بررسی شد، سپس با افزودن تراکم معینی از ناخالصی در نانو سیم سیلیکون، تأثیر حضور ناخالصی بر خواص ترابرد گرمایی مورد بررسی قرار گرفت.

$$H = \sum_{\alpha=L,C,R} H_\alpha + (u^L)^T V^{LC} u^C + (u^C)^T V^{CR} u^R \quad (۱)$$

u_j^α انحراف از موقعیت تعادلی برای j امین درجه آزادی در ناحیه α= L,C,R به ترتیب برای ناحیه چپ، مرکز و راست است که $H_\alpha = \frac{1}{2}(\dot{U}^\alpha)^T \dot{U}^\alpha + \frac{1}{2}(U^\alpha)^T K^\alpha U^\alpha$ نشان دهنده هامیلتونی هارمونیک هر یک از مناطق است. K^α ماتریس ثابت فنر است و $V^{LC} = (V^{CL})^T$ ماتریس اتصال از منبع گرمایی چپ به ناحیه مرکز است و به طور مشابه برای V^{CR} نیز چنین است. ماتریس دینامیکی سیستم به صورت زیر است:

$$K = \begin{pmatrix} K^L & V^{LC} & 0 \\ V^{CL} & K^C & V^{CR} \\ 0 & V^{RC} & K^R \end{pmatrix} \quad (۲)$$

عناصر ماتریسی صفر نشان دهنده این است که منبع گرمایی سمت چپ و سمت راست نانو سیم سیلیکون با یکدیگر بر هم کنش ندارند. تابع گرین تاخیری را می‌توان از حل معادله $[(\omega + i\eta)^2 I - K]G = I$ می توان بدست آورد[۹] .

چگالی حالت‌های فونونی از رابطه زیر بدست می‌آید [۹]:

$$DOS(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}(Trace[G]) \quad (۳)$$

جریان گرمایی بالستیک از طریق فرمول لانداور به صورت زیر بیان می‌شود [۱۰]:

$$I = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\hbar\omega T(\omega)[f_L - f_R] \quad (۴)$$

(۵)

که $f_{L,R} = \left\{\exp[\hbar\omega / k_B T_{L,R}] - 1\right\}^{-1}$ تابع بوز انیشتن برای فونون است و $T(\omega)$ ضریب انتقال فونون نامیده می-شود. اگر اختلاف منابع گرمایی چپ و راست کم باشد، رسانندگی گرمایی توسط حد زیر تعریف می‌شود [۹]:

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]

$$\sigma(T)=\lim_{T_L\to T,T_R\to T}\frac{I}{T_L-T_R}=\int_0^\infty\frac{d\omega}{2\pi}\hbar\omega T(\omega)\frac{\partial f}{\partial T} \quad (۵)$$

(۶)

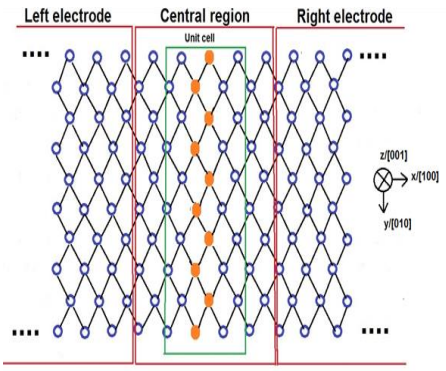
تابع گسیل فونونی به صورت $T(\omega)=Tr[G^r\Gamma_L G^a\Gamma_R]$ می‌باشد که $G^r=G^a$ تابع گرین تاخیری برای ناحیه مرکزی است، و $\Gamma_{L,R}$ نشان دهنده بر هم کنش بین منابع گرمایی و ناحیه مرکزی است.

۲- بحث

خواص ترابرد گرمایی نانو سیم سیلیکون در امتداد <۱۰۰> با یک سلول واحد با مقطع عرضی ۳×۳ بررسی شد، که طول کل آن **۳٫۴۶nm** و تعداد کل اتم‌های شبیه سازی شده ۱۵۰ عدد بود. نانو سیم سیلیکون از ^{28}Si ساخته شده و ^{29}Si و ^{30}Si به عنوان اتم ناخالصی تعیین گردیدند و در قسمت میانی نانو سیم سیلیکون قرار گرفتند.

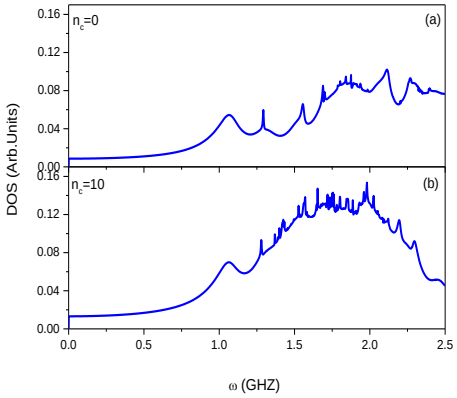
۲-۱. اثر ناخالصی ایزوتوپ

شکل (۱) ساختار نانو سیم سیلیکون را نشان می‌دهد. در این بخش ^{29}Si به عنوان اتم ناخالصی تعیین گردید و اثر حضور ناخالصی برخواص ترابرد گرمایی نانو سیم سیلیکون مورد بررسی قرار گرفت.



شکل (۱)- ساختار نانو سیم سیلیکون در حضور اتم ناخالصی که رنگ نارنجی نشان دهنده اتم ناخالصی می‌باشد.

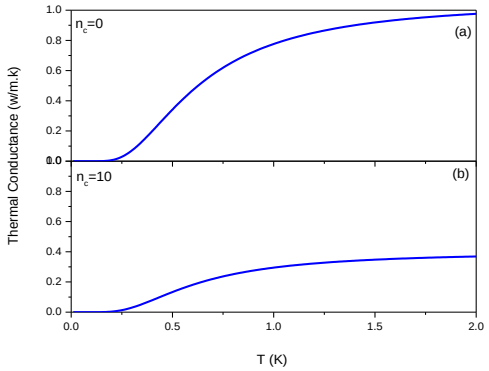
شکل (۲) بیانگر نمودار چگالی حالت‌های فونونی در غیاب و حضور ۱۰ اتم ناخالصی ($n_c=10$) می‌باشد.



شکل (۲)- چگالی حالت‌های فونونی نانو سیم سیلیکون (**a**)- بدون ناخالصی ($n_c=0$) - (**b**) در حضور اتم ناخالصی (^{29}Si) ($n_c=10$)

نتایج نشان می‌دهد که، در حضور ۱۰ اتم ناخالصی تراکم حالت‌ها در فرکانس میانی و اپتیکی افزایش می‌یابد؛ که در نهایت منجر به افزایش پراکندگی فونون-فونون می‌شود.

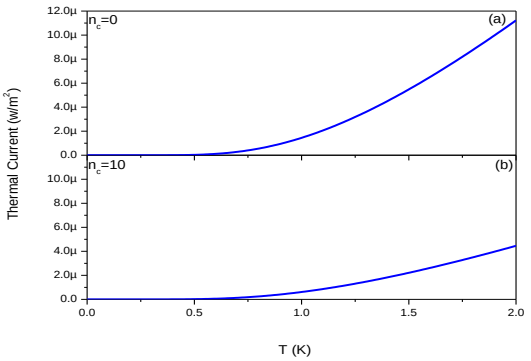
شکل (۳) و (۴) رسانندگی گرمایی و جریان گرمایی را نشان می‌دهد.



شکل (۳)- رسانندگی گرمایی نانو سیم سیلیکون- (**a**) بدون ناخالصی ($n_c=0$)-(**b**) در حضور ناخالصی (^{29}Si) ($n_c=10$)

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]

با توجه به شکل (۳) در حضور ناخالصی، رسانندگی گرمایی کاهش قابل ملاحظه‌ای پیدا می‌کند که این کاهش به دلیل افزایش پراکندگی فونون-فونون می‌باشد. جریان گرمایی (شکل (۴)) نیز در حضور اتم ناخالصی کاهش می‌یابد که به دلیل افزایش پراکندگی فونون-فونون می‌باشد.



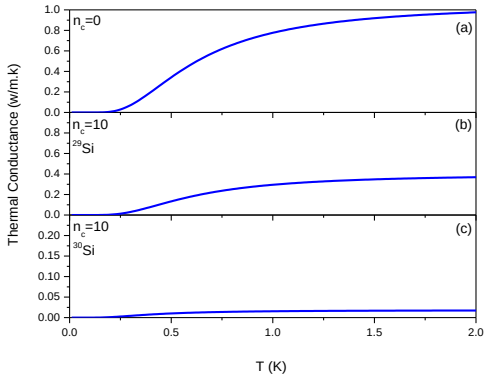
شکل (۴)- جریان گرمایی نانو سیم سیلیکون - (**a**) بدون ناخالصی ($n_C = 0$)- (**b**) در حضور ناخالصی (^{29}Si) ($n_C = 10$)

۲-۲. اثر اختلاف جرم بین اتم اصلی و اتم ناخالصی

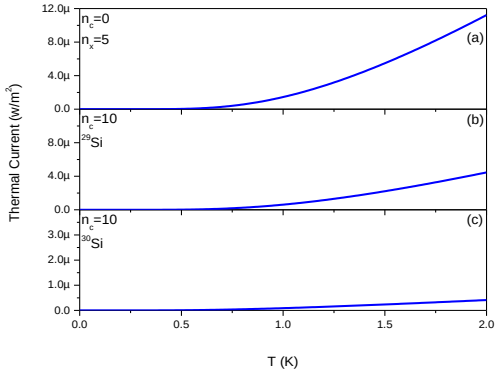
هر اتم دارای چندین ایزوتوپ می‌باشد، در این بخش ایزوتوپ سنگین‌تر (^{30}Si) به عنوان اتم ناخالصی در نظر گرفته شد. به این صورت که، اختلاف جرم اتم اصلی (^{28}Si) و اتم ناخالصی (^{30}Si) را افزایش داده، و اثر این اختلاف جرم بر خواص گرمایی نانو سیم سیلیکون مورد بررسی قرار گرفت.

شکل (۵) و (۶) رسانندگی گرمایی و جریان گرمایی را در غیاب و حضور ۱۰ اتم ناخالصی نشان می‌دهد.

با توجه به شکل (۵)، رسانندگی گرمایی هنگامی که ناخالصی با جرم سنگین‌تر (^{30}Si) حضور دارد کاهش بیش‌تری می‌یابد؛ نسبت به زمانی که جرم اتم ناخالصی سبک‌تر (^{29}Si) است؛ که دلیل این امر وابستگی فرکانس فونون به جرم می‌باشد، هم‌چنین هرچه تفاوت جرم اتم اصلی و ناخالصی بیش‌تر باشد، فونون‌ها سرعت گروه کم‌تری دارند؛ بنابراین رسانندگی گرمایی کاهش بیش‌تری پیدا می‌کند.



شکل (۵)- رسانندگی گرمایی نانو سیم سیلیکون (**a**) بدون ناخالصی ($n_C = 0$) (**b**) در حضور ناخالصی (^{29}Si) ($n_C = 10$) در (**c**) حضور ناخالصی (^{30}Si) ($n_C = 10$)



شکل (۶) جریان گرمایی نانو سیم سیلیکون -(**a**) بدون ناخالصی- (**b**) درحضور ناخالصی ^{29}Si ($n_C = 10$) - (**c**) در حضور ناخالصی ^{30}Si $(n_C = 10)$

شکل (۶) نیز گویای آن است که، جریان گرمایی در حضور ناخالصی با جرم سنگین‌تر کاهش بیش‌تری می‌یابد که دلیل این امر را می‌بایست در افزایش پراکندگی فونون-فونون جستجو کرد.

۳. نتیجه گیری

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]

نانو سیم سیلیکون در سال‌های اخیر به دلیل خواص الکتریکی، مکانیکی و کاربردهای بالقوه آن، در بسیاری از زمینه‌ها مانند بیوسنسورها توجه زیادی را به خود جذب کرده است. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی خواص ترابرد گرمایی نانو سیم سیلیکون مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان داد که، در حضور اتم ناخالصی افزایش تراکم حالت‌های فونونی منجر به افزایش پراکندگی فونون- فونون شده، بنابراین رسانندگی و جریان گرمایی کاهش می‌یابد. هم‌چنین اثر افزایش تفاوت جرم بین اتم میزبان و اتم ناخالصی بر روی ترابرد گرما بررسی گردید، نتایج نشان داد که با افزایش جرم اتم ناخالصی، رسانندگی گرمایی و جریان گرمایی کاهش بیش‌تری پیدا می‌کند که علت آن وابستگی فرکانس فونون به جرم است.

منابع

1. J Hattori and S Uno, *J. Appl. Phys*. **52** 04CN04 (2013).

2. S Sai, M.Sc. thesis of physics, National Institute of Technology Rourkela India (2013).

3. N Yang, G Zhang and B Li, *Nano letters* **8** 276 (2008).

4. L Weber, E Gmelin, *App. Phys. A.* **53** 136 (1991).

5. A Boukai, Y Bunimovich, J Tahir-Kheli, J.K Yu, W.A Goddard lii and J.R Heath, *Nature* **451** 168 (2008).

6. A. I Hochbaum, R Chen, R.D Delgado, W Liang, E.C Garnett, M Najarian, A Majumdar and P Yang, *Nature* **451** 163 (2008).

7. W S Capinks, H J Maris, E Bauser, I Silier, M Asen-palmer, T Ruf, et. al., *Appl. Phys. Lett*. **71** 2109 (1997).

8. S Chen, Q Wu, C Mishra, J Kang, H Zhang, K Cho, et. al. *Nat. Mater*. **11** 203 (2012).

9. J. S Wang, J Wang, J.T Lu, *Eur. Phys. J. B* **62** 381 (2008).

10. R Landaure, *Philosophical Magazine*. **21** 863 (1970).

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]

JMRPh. (7)(2): 44-49, Autumn and Winter, 2023

Thermal Transport in Silicon Naonowires

[1*]Azizeh Aghababaei

[1*] Damghan University, Damghan, Semnen, Iran

Article details

Received: 2020/01/17
Accepted: 2024/12/21
Published: 2024/12/31

ISSN: 2588-493x
eSSN: 2588-4821

Correspondence email:
a.aghababaei94@gmail.com

Abstract

Silicon nanowires have attracted the attention of many researchers in recent years due to their electrical and mechanical properties and also its potential applications in many fields such as biosensors. In this study, we theoretically investigated the phonon transport through silicon nanowires in the presence of isotope impurities. Heat transfer properties of silicon nanowires in the <100> direction were studied using the non-equilibrium Green's function method and the impurity atoms were placed in the middle part of the structure.

The results of this research showed that, in the presence of isotope impurity ,thermal conductivity decreases. The effect of impurity atom mass was also investigated and the results of this study also indicated that with the increase in the mass of the impurity atom, the thermal conductivity decreases more and the reason for this should be investigated in the dependence of the phonon frequency on the mass .

Keyword: Silicon nanowires, Impurity, Phonon transport, Thermal conductivity

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-01-30]