

## ФИЗИКО- МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

**УДК 538.95.405**

**Юров В.М,**

к.ф.-м.н, доцент; докторант PhD; к.ф.-м.н, доцент

Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова,  
Казахстан, Караганда, E-mail: exciton@list.ru

**Гученко С.А.**

докторант PhD

Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова,  
Казахстан, Караганда

**Лауринас В.Ч.**

к.ф.-м.н, доцент

Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова,  
Казахстан, Караганда

### **КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОСТРУКТУР**

#### **Аннотация**

Перенос теплоты сквозь наноструктуры значительно отличается от соответствующих процессов внутри макроскопических тел. К таким объектам применяются различные методы исследования, как теоретические, так и экспериментальные. Такой подход к наноструктурам дает большие преимущества. Полученные нами уравнения помимо универсальности описания свойств наноструктур, включая и теплофизические, имеют исключительное значение для анализа тонких эффектов в теплофизике.

#### **Ключевые слова:**

теплопроводность, перенос тепла, наноструктура, размерный эффект, теплофизика.

**Введение.** Исследование наноструктур с точки зрения переноса теплоты в них имеет важное значение из-за стремительного развития авиационной и космической техники, других направлений и почти во всех областях науки, техники, металлургии и т.п.

Прежде на себя обращают на себя размерные эффекты, которые отсутствуют в макроскопически твердых телах. Размерные эффекты бывают классическими в диапазоне от 1 нм до 100 нм и квантовыми размерными эффектами, которые реализуются на масштабах сопоставимой с длиной волны де Броиля.

Активные исследования наноструктур начаты сравнительно недавно [1-6], хотя статистическая теория теплопроводности твердых тел была заложена работами Пайерлса и Клеменса [7, 8].

Для металлических наноструктур вопросы теплопроводности существенно перекликаются с механизмом электрической проводимостью металла. В основе кинетического подхода электрической проводимостью металла лежит уравнение Больцмана. Причем металл рассматривается как газ свободных электронов, рассеяние которых на фонах, на дефектах и т.п. и приводит, в конечном, счете к возникновению электропроводности. За теплопроводность в металлах тоже отвечают электроны, поэтому между этими величинами существуют связи, которая дается известным законом Видемана-Франца. В наиболее общем виде этот закон между теплопроводностью  $\lambda$  и электропроводностью  $\sigma$  записывается в форме:  $\lambda = L \sigma T$  ( $L=const$ ,  $T$ -температура) и называется законом Видемана-Франца-Лоренца. Проведенные экспериментальные работы установили справедливость закона Видемана-Франца-Лоренца в приведенном виде для всех металлов независимо от зонной структуры и механизма рассеяния электронов.

Теплопроводности металлических наноструктур посвящено значительно меньше исследований [9, 10]. В настоящей работе мы проведем анализ теплопроводности нанонитей.

### Размерные эффекты в теплопроводности металлических наноструктур

Для размерной зависимости физического свойства твердого тела  $A(r)$  нами получены соотношения [4, 5]:

$$A(r) = A_0 \cdot \left(1 - \frac{d}{r}\right), \quad r \gg d, \quad (1)$$

$$A(r) = A_0 \cdot \left(1 - \frac{d}{d+r}\right), \quad r \leq d.$$

Параметр  $d$  связан с поверхностным натяжением  $\sigma$  формулой:

$$d = \frac{2\alpha v}{RT}, \quad (2)$$

Здесь  $\alpha$ —поверхностное натяжение массивного образца;  $v$ —объем одного моля;  $R$ —газовая постоянная;  $T$ —температура.

Считается, что необходимым условием для проявления наноструктурных свойств конденсированной среды является размерная зависимость ее физических свойств. «Обычные» размерные эффекты связаны с вкладом поверхностной энергии в энергию Гиббса. Их называют размерными эффектами I рода. Такие размерные эффекты характерны для любых систем и определяются рассеянием квазичастиц (электронов, фононов и пр.) на границах системы. Фазовые размерные эффекты (размерные эффекты II рода) определяются всем коллективом атомов в системе (коллективные процессы). Такие размерные эффекты наблюдаются только в наночастицах и наноструктурах. Наличие квантовых размерных эффектов накладывает фундаментальные ограничения на использование наноэлектронных элементов сверхмалых размеров. Квантово-размерные эффекты наблюдаются когда размер структуры соизмерим с волной де Броиля ( $\sim 0,01 - 0,1$  нм)

Уравнения (1)-(2) имеют универсальный характер и справедливы для размерной зависимости многих свойств наноструктур, включая теплофизические. Расчет  $\lambda$  производился по формуле, аналогичной (2):

$$\lambda(r) = \lambda_0 \cdot \left(1 - \frac{d}{d+r}\right). \quad (3)$$

Здесь  $\lambda_0$  – коэффициент теплопроводности массивного образца, значение которого взято из справочника [13],  $d$  – размерный параметр, значение которого получено нами в работе [12] и приведено в табл. 1. В табл. 2 приведено значение  $\lambda_0$ , а в табл. 3-5 представлены значения коэффициента теплопроводности наночастиц чистых металлов размером 1, 10 и 50 нм.

Таблица 1

Параметр  $d$  некоторых металлов [12]

M	d, нм								
Li	0,7	Sr	5,8	Sn	1,4	Cd	1,3	Fe	2,2
Na	1,5	Ba	6,2	Pb	1,8	Hg	0,6	Co	2,0
K	2,6	Al	1,5	Se	1,3	Cr	2,7	Ni	1,9
Rb	2,9	Ga	0,6	Te	2,5	Mo	4,6	Ce	3,8
Cs	3,6	In	1,1	Cu	1,6	W	5,8	Pr	4,2
Be	1,3	Tl	1,9	Ag	2,2	Mn	2,0	Nd	4,5
Mg	2,2	Si	3,4	Au	2,3	Tc	3,6	Sm	4,4
Ca	4,9	Ge	2,8	Zn	1,1	Re	4,6	Eu	5,8

Таблица 2

Коэффициент теплопроводности чистых металлов (M) [13]

M	$\lambda_0, B_T/(M \cdot K)$								
Li	84,8	Sr	-	Sn	65	Cr	67	Ni	92
Na	142,0	Ba	-	Pb	35	Mo	162	Ce	11

K	79,0	Al	207	Cu	395	W	130	Pr	13
Rb	58,2	Ga	33	Ag	418	Mn	8	Nd	17
Cs	35,9	In	88	Au	310	Tc	51	Sm	13
Be	182	Tl	47	Zn	111	Re	50	Eu	14
Mg	165	Si	167	Cd	93	Fe	75	Gd	11
Ca	98	Ge	60	Hg	8	Co	71	Dy	11

Таблица 3

Коэффициент теплопроводности металлических нанонитей диаметром 1 нм

M	$\lambda(r)$ Br/(M·K)								
Li	35,3	Sr	-	Sn	22	Cr	14	Ni	25
Na	45,8	Ba	-	Pb	10	Mo	22	Ce	2
K	16,8	Al	65	Cu	120	W	14	Pr	2
Rb	11,2	Ga	17	Ag	102	Mn	2	Nd	2
Cs	5,8	In	34	Au	72	Tc	8	Sm	2
Be	65	Tl	14	Zn	44	Re	6	Eu	2
Mg	40	Si	28	Cd	32	Fe	18	Gd	1
Ca	12	Ge	12	Hg	4	Co	19	Dy	1

Таблица 4

Коэффициент теплопроводности металлических нанонитей диаметром 10 нм

M	$\lambda(r)$ Br/(M·K)								
Li	29,3	Sr	-	Sn	57,0	Cr	52,8	Ni	77,3
Na	123,5	Ba	-	Pb	29,6	Mo	111,0	Ce	8,0
K	62,7	Al	180,0	Cu	340,5	W	82,3	Pr	9,2
Rb	45,1	Ga	31,1	Ag	342,6	Mn	6,7	Nd	11,7
Cs	26,4	In	79,3	Au	252,0	Tc	37,5	Sm	9,0
Be	161,1	Tl	39,5	Zn	100,0	Re	34,2	Eu	8,9
Mg	135,2	Si	124,6	Cd	82,3	Fe	61,5	Gd	7,2
Ca	65,8	Ge	46,9	Hg	7,5	Co	59,2	Dy	7,2

Из табл. 3-5 видно, что коэффициенты теплопроводности металлов размером 1 нм уменьшаются в 2 раза по сравнению с массивными образцами и при размерах в 50 нм они уже мало отличаются от последних. Это значительно отличается от размерной зависимости температуры плавления. Здесь наблюдается изменение на 2-3 порядка.

Таблица 5

Коэффициент теплопроводности металлических нанонитей диаметром 50 нм

M	$\lambda(r)$ Br/(M·K)								
Li	82,3	Sr	-	Sn	63	Cr	62	Ni	87
Na	136,3	Ba	-	Pb	33	Mo	143	Ce	10
K	73,6	Al	198	Cu	378	W	111	Pr	12
Rb	53,7	Ga	32	Ag	394	Mn	8	Nd	15
Cs	32,5	In	85	Au	291	Tc	46	Sm	12
Be	176	Tl	45	Zn	108	Re	44	Eu	12
Mg	155	Si	152	Cd	90	Fe	71	Gd	10
Ca	86	Ge	56	Hg	8	Co	67	Dy	10

**Заключение.** Создание в последнее время сложных устройств на базе нанообъектов (нанотранзисторов,nanoэлектромеханических устройств, нанотермоэлектрических устройства и т.д.), требует серьезного анализа тепловых процессов в нанообъектах и наносистемах. Помимо бурного развития наноэлектроники, появились не менее неожиданные приложения нанотехнологий, в частности в энергетике, транспорте, ракетно-космической технике, прикладной химии и т.п.

В настоящей работе показано, что учет размерных эффектов в теплопроводности наноструктур металлов приводит к существенным отличиям по сравнению с массивными образцами.

*Работа выполнена по программе МОН РК. Гранты №0118РК000063 и №Ф.0780.*

**Список использованной литературы:**

- 1 Дмитриев А.С. Тепловые процессы в наноструктурах. - М.: Изд. дом МЭИ, 2012. - 302 с.
- 2 Fisher T.S. Thermal Energy at the Nanoscale. - Singapore: World Scientific, 2013. - 171 p.
- 3 Cahill D.G., Ford W.K., & Goodson K.E., Mahan G.D., Madjumar A., Maris H.J., Merlin R. Nanoscale Thermal Transport // J. Appl. Phys., 2003, V. 93. № 2. - P. 793-802.
- 4 Cahill D.G., Braun P.V., & Chen G., Clarke D.R., Fan S., Goodson K.E., Keblinski P., et al. Nanoscale Thermal Transport II. // Appl. Phys. Rev, 2014, V. 1. № 1. - P. 011305.
- 5 Дмитриев А.С. Введение в нанотеплофизику. - М.: БИНОМ, 2015. - 792 с.
- 6 Хвесюк В.И., Скрябин А.С. Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур, 2017, том 55, № 3. - С. 447–471.
- 7 Peierls R.E. Zur kinetischen Theorie der Warmelitung in Kristallen // Ann. Phys. 1929, V. 395. - P. 1055-1066.
- 8 Klemens P. Thermal Conductivity and Lattice Vibrational Modes // Solid State Phys., 1958, V. 7. - P. 1-23.
- 9 Непийко С.А. Физические свойства малых металлических частиц. – Киев: Наукова Думка, 1985. – 243 с.
- 10 Макаров Г.Н. Экспериментальные методы определения температуры и теплоты плавления кластеров и наночастиц // УФН, 2010, Т.180, № 2. - С. 185-207.
- 11 Юров В.М. Поверхностное натяжение твердых тел // Вестник КарГУ, сер. Физика, 2007.-№ 1(45).-С.23-29.
- 12 Yurov V.M. Superficial tension of pure metals // Eurasian Physical Technical journal, 2011, Vol. 8.-№ 1(15). - P.10-14.
- 13 Таблицы физических величин. Справочник / под ред. академика И.К.Кикоина. - М.: Атомиздат, 1976.-1008 с.

© Юров В.М., Гученко С.А., Лауринас В.Ч., 2019