

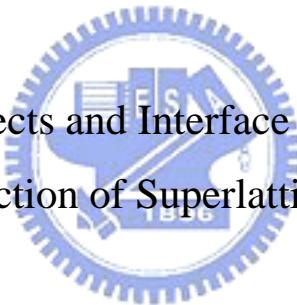
國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

尺寸效應與界面熱阻對超晶格奈米線熱傳導之影響

Influence of Size Effects and Interface Thermal Resistance on  
Heat Conduction of Superlattice Nanowires



研究 生：胡東洲

指導教授：曲新生 教授

中華民國九十四年六月

尺寸效應與界面熱阻對超晶格奈米線熱傳導之影響

Influence of Size Effects and Interface Thermal Resistance on  
Heat Conduction of Superlattice Nanowires

研 究 生：胡東洲

Student: Tung-Chou Hu

指 導 教 授：曲 新 生 教 授

Advisor: Dr. Hsin-Sen Chu

國 立 交 通 大 學

機 械 工 程 學 系



Submitted to Department of Mechanical Engineering

National Chiao Tung University

in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Mechanical Engineering

June 2004

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中 華 民 國 九 十 四 年 六 月

# 國立交通大學

## 論文口試委員會審定書

本校 機械工程 學系碩士班 胡東洲

所提論文(中文) 尺寸效應與界面熱阻對超晶格奈米線熱傳導之影響

(英文) Influence of Size Effects and Interface Thermal Resistance on Heat Conduction of Superlattice Nanowires

合於碩士資格水準、業經本委員會評審認可。

口試委員：

曲新生

陳寶林

李文有

指導教授：

曲新生

系主任：

傅武雄

教授

中華民國 九十四年 六月十日

# 尺寸效應與界面熱阻對超晶格奈米線 熱傳導之影響

研究生：胡東洲

指導教授：曲新生 教授

國立交通大學機械工程研究所

## 摘要

本文應用二維圓柱座標聲子輻射熱傳方程式，搭配修正後的聲子平均自由徑，模擬奈米線內部的熱傳問題；且進一步應用非彈性散異理論模式的假設，模擬界面熱阻對超晶格奈米線熱傳之影響。本文主要在探討溫度、幾何尺寸、界面熱阻及材料組成比率對超晶格奈米線等效熱傳導係數之影響，以提供作為未來發展熱電材料的依據。本文研究發現利用本文修正後的聲子平均自由徑，超晶格奈米線的等效熱傳導係數降低了約三分之一到二分之一左右。且超晶格奈米線的等效傳導係數受到徑向及軸向尺寸效應的雙重影響，隨著週期厚度及直徑的縮小而降低。當超晶格奈米線週期厚度小於直徑時，界面熱阻在總熱阻中所扮演的角色隨著週期厚度的縮小，越來越重要，此為「超晶格結構」的特徵；反之，當週期厚度大於直徑時，界面熱阻隨著週期厚度的增加而急遽下降，此時超晶格奈米線內部的熱傳行為趨近於「奈米線結構」，其等效熱傳導係數隨著低熱傳導係數含量的減少而降低。

# **Influence of Size Effects and Interface Thermal Resistance on Heat Conduction of Superlattice Nanowires**

Student : Tung-Chou Hu

Advisor : Dr. Hsin-Sen Chu

Institute of Mechanical Engineering  
National Chiao Tung University

## **ABSTRACT**

The size effects on thermal conductivity of superlattice nanowires with circular cross-section are investigated. The effective thermal conductivity of superlattice nanowires is predicted by using equation of phonon radiative transfer. The inelastic mismatch model (DMM) is applied to simulate the interface thermal resistance. The effective thermal conductivity of superlattice nanowires is dependent on temperature, the diameter, the periodic length and the volumetric fraction of the constituent materials. The results show that the effective thermal conductivity of Si/Si<sub>0.9</sub>Ge<sub>0.1</sub> superlattice nanowire is reduced by a factor of 3 or 2 by correcting phonon mean free path. As the result of radial and axial size effects, the effective thermal conductivity of superlattice nanowires decreases with reduction of the diameter and the periodic length. When the periodic length is smaller than the diameter, the interface thermal resistance plays an important role on heat conduction of superlattice nanowires, however, as the periodic length increases, the dominative degree of interface thermal resistance gets more and more slight. When the periodic length is smaller than the diameter, the heat conduction of the superlattice nanowire is analogy to of the nanowire. In this regime, the lower the atomic percentage of low thermal conductivity material is, the lower the effective thermal conductivity of superlattice nanowires. The results of this study can be used to develop high efficiency thermoelectric materials.

## 誌 謝

兩年的研究所生活即將結束，由衷地感謝許許多多曾經幫助過我的人。首先要特別感謝指導教授—曲新生教授，在這段時間給予我的教導與鞭策，無論是在學業上或是生活中，皆讓我獲益良多，謹此致上我最高的敬意。

感謝陳發林教授及宋齊有教授對本研究的指導與建議，使得本論文更加完善。感謝時明學長及建評學長，在我論文遇到困難時給予提點。此外，也要感謝研究室的學姊、同學及學弟們的陪伴，讓我在研究室的生活更加多采多姿。

最後，感謝我最親愛的家人及女友，這兩年的時間，有你們的支持及陪伴，我才能無後顧之憂的完成學業。謹以本論文獻給我最親愛的妹妹。



# 目 錄

中文摘要 .....	i
英文摘要 .....	ii
誌謝 .....	iii
目錄 .....	iv
表目錄 .....	vi
圖目錄 .....	vii
符號說明 .....	xi
<b>一、緒論 .....</b>	<b>1</b>
1.1 研究背景與動機.....	1
1.2 热電致冷器的原理簡介與發展 .....	2
1.3 文獻回顧.....	5
1.4 本文研究內容.....	9
<b>二、理論分析 .....</b>	<b>15</b>
2.1 聲子輻射熱傳方程式.....	15
2.2 單層二維圓柱聲子輻射熱傳分析 .....	18
2.2.1 單層二維圓柱座標聲子輻射熱傳統御方程式 .....	18
2.2.2 單層二維圓柱座標系統之邊界條件 .....	20
2.3 界面熱阻.....	20
2.3.1 聲異理論模式.....	21

2.3.2 散異理論模式.....	22
2.3.3 散射聲異理論模式.....	24
2.4 多層二維圓柱聲子輻射熱傳分析 .....	26
2.4.1 多層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式 .....	26
2.4.2 多層二維圓柱座標系統之邊界條件 .....	26
2.5 聲子平均自由徑的修正 .....	27
<b>三、數值分析 .....</b>	<b>32</b>
3.1 $S_N$ 近似法.....	32
3.2 多層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式之數值解 .....	33
3.3 數值方法之驗證.....	41
<b>四、結果與討論 .....</b>	<b>53</b>
<b>五、結論與建議 .....</b>	<b>88</b>
<b>參考文獻 .....</b>	<b>91</b>



# 表 目 錄

表 1-1 热載子基本性質 .....	11
表 3-1 二維圓柱 $S_N$ 方向餘弦和權重函數表 .....	44
表 3-2 室溫 (300K) 下材料的基本參數值 .....	45
表 3-3 室溫 (300K) 下材料的基本參數值 .....	46



# 圖 目 錄

圖 1- 1 賽貝克效應 (Seebeck effect) 示意圖.....	12
圖 1- 2 珀爾帖效應 (Peltier effect) 示意圖 .....	12
圖 1- 3 热電致冷器 (TE cooler) 工作原理示意圖 .....	13
圖 1- 4 300K溫度下热電優值五十年來的發展 .....	14
圖 2- 1 二維圓柱座標系統 .....	29
圖 2- 2 界面熱阻示意圖 .....	30
圖 2- 3 多層二維圓柱座標系統.....	31
圖 3- 1 方向餘弦離散示意圖 .....	47
圖 3- 2 數值方法流程圖 .....	48
圖 3- 3 單層二維圓柱座標格點測試圖 .....	49
圖 3- 4 半徑為 4.47mm 的單層Diamond二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，厚度分別為 $10\ \mu m$ 、 $1\ \mu m$ 及 $0.1\ \mu m$ 的溫度分佈圖 .....	50
圖 3- 5 半徑為 $10\ \mu m$ 的雙層Si/Ge二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對熱傳導係數的分佈圖 .....	51
圖 3- 6 半徑為 $10\ \mu m$ 的雙層Si/Ge二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為 1000nm、100nm及 10nm的溫度分佈圖 .....	52
圖 4- 1 長度 100nm的Si奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	61
圖 4- 2 長度及半徑皆為 100nm的Si奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，奈米線內部的溫度分佈圖：(a)MFP修正前、(b)MFP修正後 .....	62

圖 4- 3 長度 100nm、半徑 50nm的Si奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，奈米線內部的溫度分佈圖：(a)MFP修正前、(b)MFP修正後 .....	63
圖 4- 4 長度 100nm的Si奈米線，在穩態定溫邊界條件下，直徑和溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	64
圖 4- 5 長度 100nm的Ge奈米線，在穩態定溫邊界條件下，比較溫度為 300K、100K及 30K時，半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	65
圖 4- 6 長度 100nm的Ge奈米線，在穩態定溫邊界條件下，比較直徑為 100nm、50nm及 20nm時，溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	66
圖 4- 7 Si/Si <sub>0.9</sub> Ge <sub>0.1</sub> 超晶格奈米線直徑為(a) 58nm及(b)83nm，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	67
圖 4- 8 週期厚度 150nm的Si/Si <sub>0.9</sub> Ge <sub>0.1</sub> 超晶格奈米線，在穩態定溫邊界條件下，直徑和溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 ..	68
圖 4- 9 Si/Ge超晶格奈米線直徑為(a)20nm及(b)50nm，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	69
圖 4-10 Si/Ge超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	70
圖 4-11 Si/Ge超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	71
圖 4-12 直徑 100nm的Si/Ge超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為(a)200nm、(b)100nm、(c)10nm及(d)5nm	

的溫度分佈圖 .....	72
圖 4-13 直徑 50nm 的 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為(a)100nm、(b)50nm、(c)10nm 及(d)5nm 的溫度分佈圖 .....	73
圖 4-14 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對界面熱阻佔等效總熱阻比重的分佈圖 .....	74
圖 4-15 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對中心軸界面熱阻佔等效總熱阻比重的分佈圖 .....	75
圖 4-16 週期厚度 25nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	76
圖 4-17 週期厚度 50nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	77
圖 4-18 週期厚度 75nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	78
圖 4-19 週期厚度 100nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	79
圖 4-20 週期厚度 100nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖 .....	80
圖 4-21 週期厚度 50nm 的 $Si_x/Ge_{1-x}$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊	

界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖 .....	81
圖 4-22 GaAs/AlAs超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	82
圖 4-23 GaAs/AlAs超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	83
圖 4-24 Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> /Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	84
圖 4-25 Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> /Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖 .....	85
圖 4-26 Si/Ge、GaAs/AlAs及Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> /Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對界面熱阻的分佈圖 .....	86
圖 4-27 直徑 20nm的Si/Ge、GaAs/AlAs及Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> /Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對界面熱阻的分佈圖 .....	87



# 符 號 說 明

$a$  : 加速度 [ $m/s^2$ ]

$C$  : 比熱 [ $J/kgK$ ]

$c$  : 光速 [ $=3\times10^8 m/s$ ]

$D$  : 態密度 [ $m^{-3}$ ]

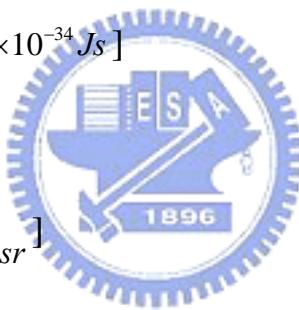
$\bar{e}$  : 單位向量

$f$  : 分佈函數

$h$  : 普朗克常數 [ $=6.626\times10^{-34} Js$ ]

$\hbar$  :  $h/2\pi$

$I$  : 聲子輻射強度 [ $W/m^2 sr$ ]



$J$  : 電流 [ $A$ ]

$k$  : 热傳導係數 [ $W/mK$ ]

$k_B$  : 波茲曼常數 [ $=1.38\times10^{-23} J/K$ ]

$L$  : 圓柱厚度 [ $m$ ]

$L_e$  : 偶數層厚度 [ $m$ ]

$L_o$  : 奇數層厚度 [ $m$ ]

$N$  : 數量密度 [ $m^{-3}$ ]

$Q$  : 總熱傳量 [ $W$ ]

$q$  : 热通量  $[W/m^2]$

$R$  : 反射率或圆柱半径  $[m]$

$R_I$  : 界面热阻  $[m^2 K/W]$

$R_M$  : 材料热阻  $[m^2 K/W]$

$R_T$  : 总热阻  $[m^2 K/W]$

$r$  : 径向距离  $[m]$

$\bar{r}$  : 位置向量

$S$  : 赛贝克系数  $[V/K]$

$\bar{s}$  : 辐射强度行进方向

$T$  : 绝对温度  $[K]$

$t$  : 时间  $[s]$



$t_R$  : 驱弛时间  $[s]$

$V$  : 电压  $[V]$

$v$  : 速率或群速  $[m/s]$

$\bar{v}$  : 速度向量

$w$  : 权重因子

$Z$  : 声阻抗  $[=\rho v]$

$z$  : 轴向距离  $[m]$

$ZT$  : 无因次化热电优值

希臘字母

$\phi$ ：方位角  $[rad]$

$\eta$ ：方向餘弦  $[sin\theta sin\phi]$

$\Lambda_{bulk}$ ：平均自由徑  $[m]$

$\Lambda^*$ ：修正過後的平均自由徑  $[m]$  (Eq.(2-44))

$\lambda$ ：波長  $[m]$

$\mu$ ：方向餘弦  $[sin\theta cos\phi]$

$\Pi$ ：珀爾帖係數  $[V]$

$\theta$ ：極角  $[rad]$

$\vartheta$ ：阻泥係數  $[s]$

$\rho$ ：密度  $[kg/m^3]$

$\sigma$ ：導電率  $[sm]$

$\tau$ ：穿透率

$\tilde{v}$ ：等效速度  $[m/s]$

$\Omega$ ：立體角  $[sr]$

$\omega$ ：頻率  $[s^{-1}]$

$\omega_D$ ：德拜截止頻率  $[s^{-1}]$

$\xi$ ：方向餘弦  $[cos\theta]$



上標：

$0$ ：平衡狀態

下標：

$b$ ：bottom

$bound$ ：boundary scattering

$c$ ：circle

$collision$ ：碰撞

$defect$ ：scattering between phonon and defect

$eff.$ ：effective

$k$ ：第  $k$  層材料

$p$ ：period

$ph-e$ ：scattering between phonon and electron

$ph-ph$ ：scattering between phonon and phonon

$t$ ：top

$z$ ：軸向



# 一、緒論

## 1.1 研究背景與動機

隨著半導體技術的進步，不僅成功發展出 90 奈米線寬製程，更進一步朝向 65 奈米線寬發展。線寬的縮小使得同樣面積的晶圓上可聚集更多的元件，降低製作成本，也大大地提高元件的運算速度。但也因電子元件的高密度聚集，運轉時產生的熱將嚴重影響其性能，因此微電子元件散熱是一個日益嚴重的問題。在微觀尺寸系統或奈米尺寸系統中，傳統用於巨觀上的傅立葉熱傳導定律（Fourier law of heat conduction）已不適用，因此近十多年來發展許多微觀熱傳理論（Microscale heat transfer theory）。例如分析半導體及介電材料微結構的熱傳現象，有學者使用聲子輻射熱傳方程式（Equation of phonon radiative transfer）來處理[Majumdar, 1993]。近年來，許許多多的學者基於此理論，發現熱物理性質，如熱傳導係數，不再只是材料本質上的參數，材料的尺寸、幾何形狀均會對其造成影響。當系統尺寸接近材料的聲子平均自由徑（Mean free path）時，熱傳導係數隨著系統尺寸的縮小明顯下降，此即為眾所周知的尺寸效應（Size effects）。另外，界面對熱傳導係數的影響隨著尺度的縮小越來越重要，不同材料間晶格的不連續阻礙了熱傳輸行為，因此有了界面熱阻（Interface thermal resistance）的概念。本文利用聲子輻射熱傳方程式結合非彈性散射界面理論，處理超晶格奈米線（Superlattice nanowires）的熱傳行為，而文獻上模擬半導體微結構熱傳現象的理論很多，本文期望以較簡便的修正已逼近實驗結果，且進一步分析尺寸、半徑以及材料組成比率對等效熱傳導係數的影響。

## 1.2 热電致冷器的原理簡介與發展

早在十九世紀，熱電效應的現象就被人們所發現。所謂的「熱電效應 (Thermoelectric effects)」，簡單來說，就是熱能和電能間相互轉換的一種機制。一般來說，熱電效應可以細分成三種：賽貝克效應 (Seebeck effect)、珀爾帖效應 (Peltier effect) 和湯姆森效應 (Thomson effect)。

### 賽貝克效應：

賽貝克效應 (Seebeck effect) 是由一位德國的科學家 Thomas Johann Seebeck 在西元 1822 年所發現的。他將 A 和 B 兩種不同材料的導體串接起來形成一個封閉迴路，若在 A 和 B 材料接觸的兩端有溫度差的話，就會造成電壓差而產生電流，如圖 1-1 所示。也發現到接觸兩端的溫度差和其產生的電壓差成一個正比的關係，因此定義出賽貝克係數 (Seebeck Coefficient)，而電壓差、溫度差和賽貝克係數的關係如下：

$$S = -\frac{V_{12}}{\Delta T} \quad (1-1)$$

$S$  即為塞貝克係數，賽貝克係數又可稱為熱電勢 (Thermoelectric power)， $V_{12}$  是產生的電壓差， $\Delta T$  是 A、B 材料接觸兩端的溫度差。賽貝克效應也是製作熱電偶 (Thermocouple) 和熱電發電器 (Thermoelectric power generator) 的基本原理。

### 珀爾帖效應：

在賽貝克效應被發現幾年後，一位法國的的錶匠 Jean Charles Athanase Peltier 在 1834 年發表了珀爾帖效應 (Peltier effect)，他將 A 和 B 兩種不同材料的導體串接並通予電流形成通路，發現在 A 和 B 接觸的一端會產生熱，而另一端則會有溫度下降的現象，如圖 1-2。並且發現在 A、B 材料的接觸端所產生的熱量（或另一端被吸收的熱量）會和通入的電流大小成正比，因此定義出珀爾帖係數 (Peltier coefficient)，其和熱傳量及電流的關係如下：

$$Q = \Pi J \quad (1-2)$$

$\Pi$  是珀爾帖係數， $Q$  是總熱傳量， $J$  是電流。

湯姆生效應：

在 1847 年，物理學家 William Thomson (後來又有人稱之 Lord Kelvin) 建立了熱電現象的理論基礎，他所得的結論是當兩種不同導體材料接觸的兩端在已經有溫度差的情況下，再通予電流，而電流可以控制接觸兩端增加或減少溫度差的情形，此即稱為湯姆生效應 (Thomson effect)。他還推導出賽貝克係數和珀爾帖係數之間的關係：

$$\Pi = ST \quad (1-3)$$

上式稱為 Kelvin relation，其中  $T$  為絕對溫度。

上述的三種熱電效應彼此間都有極大的關聯，也可發現賽貝克效應和珀爾帖效應其實就是一體兩面的關係。而所謂的熱電致冷器

(Thermoelectric cooler、簡稱 TE cooler) 的基本原理就是珀爾帖效應，它利用珀爾帖效應將熱藉由電子的移動送到另一端，藉此達到冷卻的效果。一般熱電致冷器的性能是由一無因次參數—熱電優值 (the figure of merit) 來衡量[1]，其定義為：

$$ZT = \frac{\sigma \cdot S^2 \cdot T}{k} \quad (1-4)$$

其中  $\sigma$  為材料的電子導電率 (Electrical conductivity)、 $S$  為材料的賽貝克係數、 $T$  為絕對溫度 (Absolute temperature)、 $k$  為材料的熱傳導係數 (Thermal conductivity)。由 (1-4) 式，我們可以發現材料的導電率越好、賽貝克係數越大，或者材料的熱傳導係數越低，則會增加熱電致冷器的性能，這和一般散熱裝置需要高傳導係數的傳統觀念相違背。因為熱電致冷器的主要原理是利用電子帶走熱量，而在 (1-4) 式中被放在分母的熱傳導係數是為了防止熱量回流的現象，所以熱傳導係數反而越低越好，熱電致冷器的示意圖如圖 1-3。

根據 Wiedmann-Franz 定律[2]知道金屬材料的導電率和熱傳導係數成正比，而絕緣體則不導電，因此認為半導體為最適當的熱電材料。不管何種材料，熱都是藉由熱載子 (Heat carrier) 間的相互碰撞而傳遞的，自然界中的主要熱載子有電子 (Electrons)、聲子 (Phonons) 和光子 (Photons)，各有不同的性質，可參考表 1-1 [3]。而在半導體材料中的熱傳導係數大部分都是由聲子所貢獻的，故如何有效的降低聲子的熱傳導係數，且不使電子導電率下降太多，將有助於提升熱電致冷器的性能。

## 1.3 文獻回顧

早在十九世紀初期 Seebeck 和 Peltier 就已經證實了熱電效應 (Thermoelectric effects) 的存在，提供了熱能和電能互相交換的橋樑，到了二十世紀初期，利用此一原理發展出熱電發電器和熱電制冷器。1950 年代，利用半導體合金的技術將室溫下的 ZT 值提升至 1 左右，但這距離實際大量商品化的階段仍有一段不小的差距。1982 年 Ren 和 Dow [4] 第一次成功預測到超晶格 (Superlattice) 結構的熱傳導係數遠低於塊材 (Bulk) 結構，1987 年 Yao [5] 也顯示傅立葉定律高估了超晶格結構的熱傳導係數。到了 1990 年代，隨著半導體薄膜沉積技術的成熟以及多層狀低維度材料的應用，室溫下的 ZT 值獲得明顯的改善。2001 年 Venkatasubramanian [6] 製作了鉍化碲/鎢化碲 ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ) 週期性薄膜結構並在室溫下量得其 ZT 值為 2.4。由此可見，低維度材料對於提升 ZT 值有明顯的貢獻。2002 年 Chen 和 Shakouri [7] 對此分別從電子的尺寸效應、界面處熱離子放射效應和聲子界面散射效應三方面作一詳盡的回顧。

由上可知，若要模擬這些低維度材料的熱傳現象，利用傳統的傅立葉熱傳方程式是行不通的，必須回歸最基本的粒子傳輸方程式—波茲曼傳輸方程式 (Boltzmann transport equation) 來處理。1993 年 Majumdar [8] 將聲子類比作光子的概念，推導出聲子輻射熱傳方程式 (Equation of phonon radiative transfer、簡稱 EPRT)，且證實穩態下，當尺寸逐漸放大時，即薄膜厚度遠大於聲子平均自由路徑，可得到和傅立葉熱傳定律相同的結果。2003 年 Prasher [9] 進一步比較 EPRT 和輻射熱傳方程式 (Equation of radiative transfer、簡稱 ERT) 之間的差異，認為若系統中存在有缺陷 (Defects) 當作散射源，聲子可類比光

子定義出一等效的散射相函數 (Phase function)，推導出更具一般性的聲子輻射熱傳方程式 (Generalized equation of phonon radiative transport、簡稱 GEPRT)，此方程式在等向性散射假設下可簡化為 EPRT。2003 年 Zeng 和 Liu [10] 將 EPRT 推廣至一維球座標及二維圓柱座標，發覺非平板薄膜系統的等效熱傳導係數受內徑和薄膜厚度的影響。

而過去十年來，由於超晶格結構的低熱傳導係數使其常被應用於熱電裝置。許多實驗也證實半導體超晶格結構如砷化鎵/砷化鋁 (GaAs/AlAs)、矽/鎵 (Si/Ge)、鉻化碲/錫化碲 (Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>/Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>) 等均有相當低的熱傳導係數，甚至低於其所對應的半導體合金，因此許多學者嘗試建立一套可信的模式探討熱傳導係數降低的主要機制。有一部份學者將聲子視作粒子傳輸行為，使用波茲曼傳輸方程式，忽略波的干涉效應來處理。如：1997 年 Chen 和 Neagu [11] 探討超晶格結構平行薄膜沈積方向 (Cross-plane) 的熱傳導係數，比較完全鏡射 (Specular) 界面和完全漫射 (Diffuse) 界面的影響，發現熱傳導係數受到完全漫射界面的影響較嚴重。但前述完全鏡射和完全漫射界面的結果和實驗值仍有段差距，Chen 在 1997 [12]、1998 [13] 年分別針對垂直薄膜沈積方向 (In-plane) 和 Cross-plane 方向的超晶格熱傳導係數作分析，引進了一界面鏡射參數 (The interface specularity parameter)，認為界面的性質應是由部分鏡射和部分漫射所共同影響。結果發現兩者對熱傳導係數的影響不單純是簡單的線性關係，驗證了漫射界面是熱傳導係數降低的主因，更進一步找到最適當的界面鏡射參數逼近實驗結果。另外有另一批學者如 Hyldgaard、Mahan [14] 以及 Tamura [15] 將聲子視作波動行為，解釋熱傳導係數的降低是由於高頻的聲子群速 (group velocity) 被限制而降低的緣故。2000 年 Simkin

和Mahan [16]結合波動與粒子傳輸理論，發現在薄膜厚度小於聲子平均自由徑時有最小的熱傳導係數。2003 年 Yang 和 Chen [17]修正前文引入一界面鏡射參數，考慮界面存在漫射效應，模擬砷化鎵/砷化鋁超晶格在Cross-plane和In-plane的熱傳導係數。發現熱傳導係數隨著週期厚度縮小而降低，但當週期厚度小至聲子平均自由徑時，若進一步將週期厚度縮小，熱傳導係數反而有回復的趨勢，推測是由於聲子產生穿遂效應 (Tunneling effect) 下的結果。不僅僅在砷化鎵/砷化鋁超晶格結構發現此一現象，2000 年 Venkatasubramanian [18]量測鈦化碲/鎳化碲超晶格也發現在週期厚度和聲子平均自由徑相當時有最低的熱傳導係數。

近幾年來，奈米線 (Nanowire) 和超晶格奈米線 (Superlattice nanowire) 逐漸成為低維度半導體材料的重心，2002 年 Fon 等人 [19] 測量了砷化鎗奈米線的熱傳導係數，2003 年 Li 等人 [20] 測量了矽奈米線的熱傳導係數，以上實驗均發現奈米線的熱傳導係數比同材料的塊材直低。1999 年 Volz 等人 [21] 利用分子動力學模擬正方形截面的矽奈米線，發覺在 200K-500K 溫度下的熱傳導係數比塊材矽晶格低了一至兩個數量級，另外和使用 BTE 模擬的結果相仿，證實了邊界漫射效應是造成熱傳導係數降低的原因。Khitun 等人 [22] 在 2000 年同時考慮聲子及電子的尺寸效應，發現儘管電子的遷移率因尺寸效應而降低，聲子熱傳導係數降低的幅度仍有效的提升奈米線的熱電性質。2001 年 Zou 等人 [23] 以 BTE 為基礎，並考量邊界散射效應計算矽奈米線的熱傳導係數，認為聲子的尺寸效應及邊界散射效應是奈米線熱傳導係數降低的主要原因。2002 年 Lu 等人 [24] 探討尺寸效應對矩形截面奈米線熱傳導係數的影響，發覺隨著奈米線邊長的縮小，增加了邊界散射機會，因而降低了熱傳導係數。2003 年 Mingo 等人 [25]

建立了一套奈米線熱傳導係數對溫度變化的理論，直徑在 37nm 以上的矽奈米線所預測的熱傳導係數和實驗量測結果相符。Wu 等人[26]在 2002 年發展了一套製作超晶格奈米線的方法—PLA-CVD。2003 年 Lin 和 Dresselhaus [27]建立一套超晶格奈米線的電子結構和傳輸性質的理論模式，發現超晶格奈米線的熱電性質和單層材料厚度、線直徑、軸向結晶方向以及兩層材料所佔的比率有關。不管是 N 型或 P 型半導體，當超晶格奈米線的直徑小至 5 奈米時，ZT 值隨著單層厚度的改變出現明顯的振盪現象。另外發現 P 型半導體的最大 ZT 值比 N 型來的高，而如果同樣是 N 型半導體就得比較材料本身的熱電性質。2004 年 Dames 和 Chen [28]發展一套計算矽/鍺超晶格奈米線熱傳導係數的模式，他們認為在製作超晶格奈米線時，很難做到真正平坦完美的界面，使得粗糙度抵銷了量子干涉效應，可由粒子碰撞的角度模擬聲子熱傳行為，且利用非彈性散異理論模式處理界面熱阻，並假設所有散射效應和頻率無關，服從 Matthiessen 規則[29]，發現熱傳導係數隨著尺寸的縮小而降低，同年度 Chen 等人[30]利用分子動力學模擬氬/氬超晶格奈米線，得到的結果比純氬奈米線的熱傳導係數還要低三分之一，認為多層狀結構的超晶格奈米線比奈米線更適合熱電上的應用。

由於處理超晶格和超晶格奈米線等層狀材料時，除了薄膜厚度所造成的尺寸效應以外，薄膜界面因材料不連續造成的界面熱阻亦是一個常被廣泛討論的議題。1959 年，Little [31] 首先利用聲異理論模式 (Acoustic mismatch model、簡稱 AMM 模式)，來處理固體與固體間界面熱阻的問題，此一模式假設邊界為一平滑界面，聲子行經此一界面時不發生散射效應，只考慮穿透及反射效應，界面熱阻主要由材料的吸收造成，其穿透率及反射率遵循幾何光學。1989 年，Swartz [32]

進一步提出散異理論模式 (Diffuse mismatch model、簡稱 DMM 模式)，此一模式與聲異理論模式的假設完全相反，它假設所有的聲子在邊界上均受到無方向性的散射，且散射後的狀態與散射前的狀態無關。1998 年，Phelan [33]針對 AMM 與 DMM 模式做了更詳細的比較，結果指出 AMM 模式只有在極低溫的情況下才有較佳的模擬結果。隨著溫度的上升，聲子物質波波長的縮短至與界面粗糙度相當時，便不能忽略散射效應，因而 AMM 模式不再適用，使用 DMM 模式所求得的界面熱阻會比使用 AMM 模式更接近實驗結果。1998 年，Chen [13]進一步將 AMM 模式和 DMM 模式推廣至非彈性散射，並將之應用於波茲曼傳輸方程式，處理超晶格結構的熱傳現象，和實驗結果相近。2001 年，Prasher 和 Phelan [34]比較 EPRT 和 ERT 兩個方程式，將 AMM 模式加以修正，進而提出散射聲異理論模式(Scattering-mediated acoustic mismatch model、簡稱 SMAMM)，認為除了吸收項造成的界面熱阻外還有散射效應需要考慮。



## 1.4 本文研究內容

1990 年以來，半導體薄膜沈積技術的進步，多層薄膜結構廣泛地被應用於提升熱電裝置的熱電性質，圖 1-4 [35]為 1950 年至 2000 年 300K 溫度下熱電優值的進展，可以明顯看出奈米結構的熱電材料有助於熱電優值的提升。過去文獻已經針對超晶格結構有相當完整的探討，發現當薄膜厚度接近聲子平均自由徑時，等效熱傳導係數隨著薄膜厚度的縮小而下降。另一方面，研究指出超晶格奈米線在熱傳導係數的降低量比多層薄膜結構來的大，在未來將是最有潛力的熱電材料之一，本文利用二維圓柱座標系統的聲子輻射熱傳方程式，搭配非

彈性散異理論模式處理界面問題。探討超晶格奈米線的週期厚度、直徑及組成比率對其等效熱傳導係數之影響，並分析溫度對奈米線及超晶格奈米線熱傳行為之影響。此外，進一步考量其物理的幾何尺寸對聲子散射所造成的影響，以 Matthiessen 規則修正材料的平均自由徑，期望利用巨觀且容易獲得的物理參數，配合微觀熱傳理論將模擬結果更逼近實驗值。



表 1-1 热载子基本性质[3]

	Free electrons	Phonons	Photons
Generation	Ionization or excitation	Lattice vibration	Atomic, molecule transition
Propagation media	In vacuum or media	In media only	In vacuum or media
Statistics	Fermi-Dirac	Bose-Einstein	Bose-Einstein
Frequency	$0 - \infty$	$0 - \omega_D$	$0 - \infty$
Dispersion	$E = \hbar^2 \omega^2 / (2m)$	$E = E(\omega)$	$v = c / \lambda$
Velocity ( $m/s$ )	$\sim 10^6$	$\sim 10^3$	$\sim 10^8$

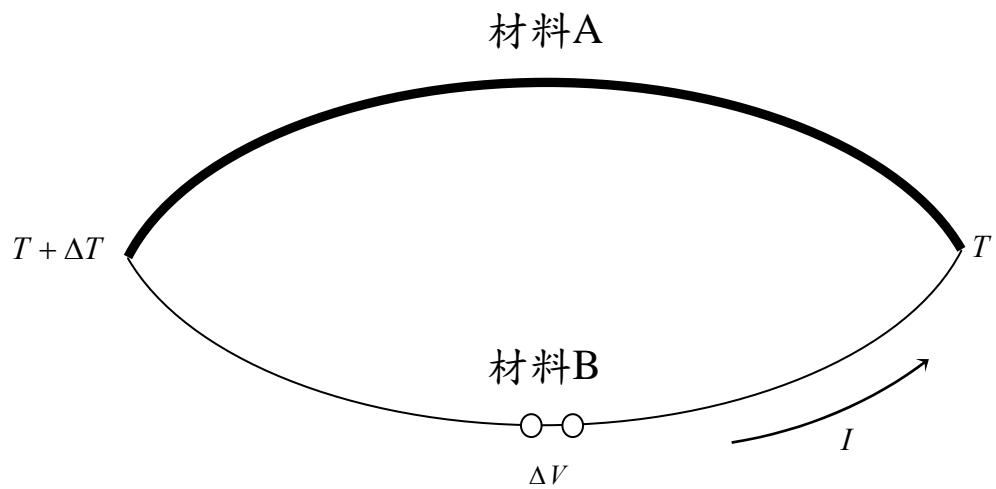


圖 1-1 賽貝克效應 (Seebeck effect) 示意圖

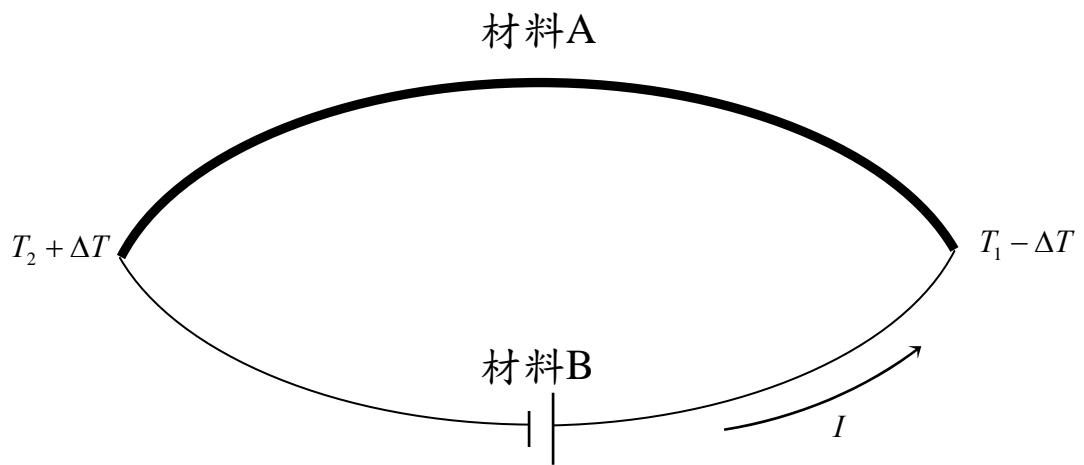
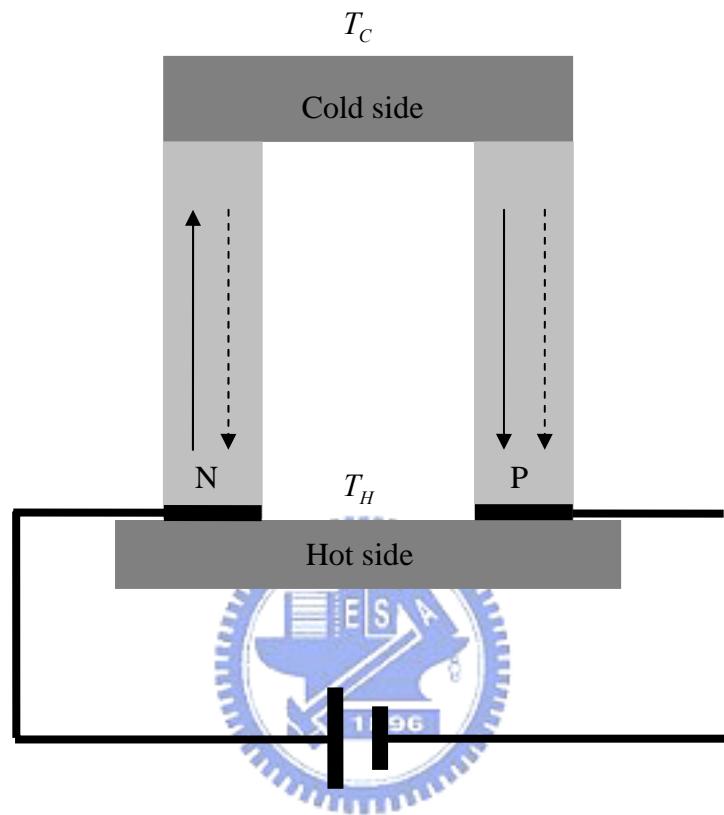


圖 1-2 珀爾帖效應 (Peltier effect) 示意圖



→ 热傳方向或電子流方向

→ 電流方向

圖 1-3 热電致冷器 (TE cooler) 工作原理示意圖

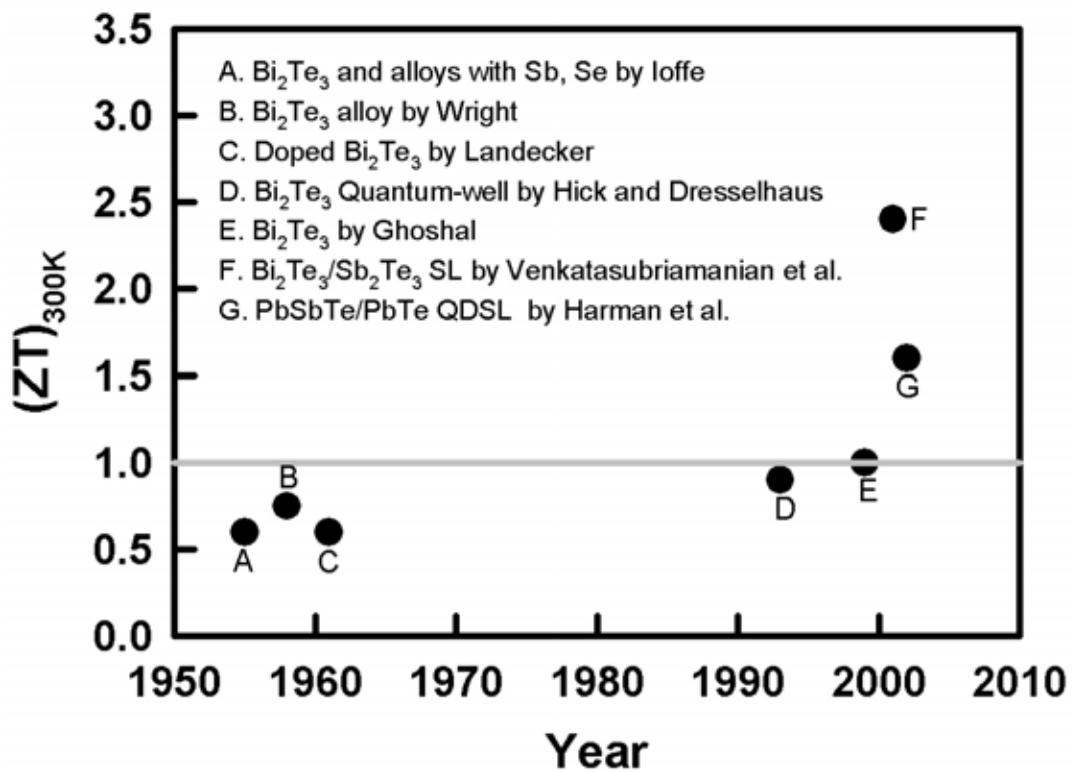


圖 1-4 300K 溫度下熱電優值五十年來的發展[35]

## 二、理論分析

由於傳統的傅立葉熱傳定律在奈米尺度系統中不再適用，為了分析二維圓柱下的微觀熱傳現象，我們採用 Majumdar [8]於 1993 年為了處理一維平板薄膜的熱傳現象而導出的聲子輻射熱傳方程式 (Equation of phonon radiative transfer、簡稱 EPRT)，進一步推廣至二維圓柱座標，導出二維圓柱聲子輻射熱傳方程式，用以分析超晶格奈米線的熱傳問題。此外，超晶格奈米線是由兩種材料週期性的沈積，界面熱阻也會影響整個熱傳輸行為，目前已發展數種界面理論，我們嘗試套用不同的理論模式分析界面熱阻對熱傳現象的影響。



### 2.1 聲子輻射熱傳方程式

在半導體固態材料中，聲子為主要熱載子，且在熱力學平衡下的統計分佈函數 (Distribution function) 遵循玻司-愛因斯坦分佈 (Bose-Einstein distribution)，和光子的分佈函數相似。而在微觀尺度下，無法明確定義出溫度梯度的存在，所以傳統的傅立葉傳導定理不再適用，為了要討論在微觀下的熱傳模式，必須從粒子碰撞導致熱傳的角度切入，粒子的分佈函數為位置  $\bar{r}$  和速度  $\bar{v}$  的函數，並考慮分佈函數隨著時間的變化可以表示為  $f(t, \bar{r}, \bar{v})$ 。從古典力學中的 Liouville 定理，延著同一條流線的所有相空間 (Phase space) 為一固定常數，也就是說延著同一條流線上的分佈函數是守恆的，不隨著時間而改變，所以分佈函數隨時間的改變量為零：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla_{\bar{r}} f + \bar{a} \cdot \nabla_{\bar{v}} f = 0 \quad (2-1)$$

其中  $\bar{a}$  為加速度。若考慮粒子碰撞，分佈函數的守恆性遭到破壞，可表示為：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla_{\bar{r}} f + \bar{a} \cdot \nabla_{\bar{v}} f = \left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{collisions} \quad (2-2)$$

$\left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{collisions}$  為分佈函數因粒子碰撞造成的改變量，上式即為波茲曼傳

輸方程式（Boltzmann transport equation、簡稱 BTE）。

Majumdar 將此方程式應用於半導體和介電材料，其主要熱載子為聲子，由於固態材料中的聲子傳輸速度接近聲速，傳輸速度的改變量並不明顯，因此加速度項  $\nabla_{\bar{v}}$  可以被忽略：



$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla_{\bar{r}} f = \left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{collisions} \quad (2-3)$$

此外，聲子碰撞的情形極為複雜，若要直接處理將導致方程式過於困難，為了簡化方程式右邊的碰撞項，假設能量傳遞時間遠小於聲子碰撞時間，因此可利用鬆弛時間  $t_R$  (Relaxation time approximation) 處理，將碰撞項線性化：

$$\left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{collisions} = \frac{f^0 - f}{t_R} \quad (2-4)$$

其中  $f^0$  為平恆狀態下的分佈函數，故波茲曼傳輸方程式可改寫為：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = \frac{f^0 - f}{t_R} \quad (2-5)$$

並考慮分佈函數為頻率  $\omega$  的函數，且速度可用  $\vec{v} = v \cdot \vec{e}_v$  表示，所以 (2-5) 式可簡化為：

$$\frac{1}{v} \frac{\partial f_\omega}{\partial t} + \vec{e}_v \cdot \nabla_{\vec{r}} f_\omega = \frac{f_\omega^0 - f_\omega}{vt_R} \quad (2-6)$$

再將聲子類比為光子，可以將聲子的輻射強度 (Intensity)  $I_\omega$  表示為：

$$I_\omega(\theta, \phi, r, t) = \sum_p \vec{v}(\theta, \phi) f_\omega(r, t) \hbar \omega D(\omega) \quad (2-7)$$

其中  $\vec{v}(\theta, \phi)$  為單位立體角內  $(\theta, \phi)$  方向上的速度向量， $\hbar$  為普朗克常數  $h$  (Planck's constant) 除以  $2\pi$ ， $D(\omega)$  為單位體積下的態密度 (Density of state)，(2-7) 式也就是單位時間、單位面積、單位立體角下聲子行進方向上的能量通量，亦就是我們所知的光子強度的定義。於是我們將 (2-6) 式的分佈函數同乘以  $\vec{v} \hbar \omega D(\omega)$ ，可得到如下的方程式：

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \vec{e}_v \cdot \nabla_{\vec{r}} I_\omega = \frac{I_\omega^0 - I_\omega}{vt_R} \quad (2-8)$$

所得到的 (2-8) 式就是 Majumdar [8] 在 1993 年所提出來的聲子輻射熱傳方程式 (EPRT)，可以用來分析微觀尺度下，材料內部以聲子為主要熱載子的熱傳行為。

## 2.2 單層二維圓柱聲子輻射熱傳分析

### 2.2.1 單層二維圓柱座標聲子輻射熱傳方程式

二維圓柱系統的物理模型如圖 2-1。由於聲子輻射強度為半徑  $r$ 、極角 (Polar angle)  $\theta$ 、方位角 (Azimuthal angle)  $\phi$  及軸向長度  $z$  的函數，聲子輻射強度對行進方向  $\vec{s}$  的微分如下：

$$\vec{e}_v \cdot \nabla I_\omega = \frac{dI_\omega}{ds} = \frac{\partial I_\omega}{\partial r} \frac{dr}{ds} + \frac{\partial I_\omega}{\partial \theta} \frac{d\theta}{ds} + \frac{\partial I_\omega}{\partial \phi} \frac{d\phi}{ds} + \frac{\partial I_\omega}{\partial z} \frac{dz}{ds} \quad (2-9)$$

其中聲子輻射強度均朝同一極角向外輻射，因此行進方向對極角的微分為 0，各項表示如下：



$$\frac{dr}{ds} = \sin \theta \cos \phi \quad (2-10a)$$

$$\frac{d\theta}{ds} = 0 \quad (2-10b)$$

$$\frac{d\phi}{ds} = -\frac{\sin \theta \sin \phi}{r} \quad (2-10c)$$

$$\frac{dz}{ds} = \cos \theta \quad (2-10d)$$

將 (2-9)、(2-10a)、(2-10b)、(2-10c)、(2-10d) 代入方程式 (2-8) 得：

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \sin \theta \cos \phi \frac{\partial I_\omega}{\partial r} - \frac{\sin \theta \sin \phi}{r} \frac{\partial I_\omega}{\partial \phi} + \cos \theta \frac{\partial I_\omega}{\partial z} = \frac{I_\omega^0 - I_\omega}{vt_R} \quad (2-11)$$

整理如下：

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \frac{\mu}{r} \left[ \frac{\partial(rI_\omega)}{\partial r} \right] - \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial(\eta I_\omega)}{\partial \phi} \right] + \xi \left[ \frac{\partial I_\omega}{\partial z} \right] = \frac{I_\omega^0 - I_\omega}{vt_R} \quad (2-12)$$

其中  $\mu = \sin \theta \cos \phi$  、  $\eta = \sin \theta \sin \phi$  、  $\xi = \cos \theta$  ，分別為三個座標軸的方向餘弦 (Direction cosine)。在平衡狀態的聲子輻射強度定義為：

$$I_\omega^0 = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_\omega d\Omega \quad (2-13)$$

且假設介質為灰體 (Gray body)，故聲子輻射強度與頻率無關，且本文只考慮穩態下之熱傳現象，對時間的微分項為 0，整理可得如下方程式：



$$\frac{\mu}{r} \left[ \frac{\partial(rI)}{\partial r} \right] - \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial(\eta I)}{\partial \phi} \right] + \xi \left[ \frac{\partial I}{\partial z} \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I d\Omega - I}{vt_R} \quad (2-14)$$

此即為二維圓柱座標聲子輻射熱傳統御方程式。其中，平衡強度與溫度間的轉換可由下列關係式獲得：

$$\frac{dI^0}{dT} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\omega_D} \nu_m h \omega D(\omega) \frac{df^0}{dT} d\omega = \frac{\nu C}{4\pi} \quad (2-15)$$

其中  $\omega_D$  為德拜截止頻率 (Debye cut-off frequency)， $C$  為材料比熱 (Specific heat)， $\nu$  為聲子群速 (Group velocity)。

## 2.2.2 單層二維圓柱座標系統之邊界條件

在二維圓柱系統的三的面給予三個定溫邊界條件，再由 (2-15) 式求出平衡狀態下所對應的聲子輻射強度，如下：

$$I = I^0(T_b) \quad z = 0 \quad (2-16a)$$

$$I = I^0(T_t) \quad z = L \quad (2-16b)$$

$$I = I^0(T_c) \quad r = R \quad (2-16c)$$

而在中心軸  $r = 0$  處，給予對稱邊界條件：

$$I(r = 0^+) = I(r = 0^-) \quad (2-17)$$



## 2.3 界面熱阻

利用聲子輻射熱傳模式處理多層結構，必須針對界面散射問題加以考慮，由於不同材料間的晶格出現中斷，阻礙了聲子的傳輸，產生了界面熱阻的觀念，如圖 2-2。聲子穿過界面處時，因材料晶格發生變化產生散射現象，有部分聲子穿透界面，而另一部份則會發生反射，因而在界面處產生溫降 (Temperature drop)。界面熱阻的定義為：

$$R_I = \frac{\Delta T}{q} \quad (2-18)$$

其中  $\Delta T$  為界面兩端的溫度差， $q$  為單位面積的熱通量。

許多研究指出[10-13, 28, 31-34]界面熱阻對熱傳導係數有明顯的

影響，以下對於各種不同的界面熱阻理論加以說明，其中包括彈性聲異理論模式、非彈性聲異理論模式、彈性散異理論模式、非彈性散異理論模式和散射聲異理論模式。

### 2.3.1 聲異理論模式

聲異理論模式 (Acoustic mismatch model、簡稱 AMM) 是由 Little [31] 於 1959 年提出，他假設界面為完全光滑鏡面，界面熱阻全是由吸收所造成的。聲子經過界面時，散射效應可以被完全忽略而不考慮，單單只發生穿透及反射行為，且入射角與折射角遵循幾何光學中的 Snell's Law：

$$\frac{\sin \theta_1}{v_1} = \frac{\sin \theta_2}{v_2} \quad (2-19)$$



界面反射率和穿透率表示如下：

$$R_{12}(\mu_1) = \left| \frac{Z_1 \mu_1 - Z_2 \mu_2}{Z_1 \mu_1 + Z_2 \mu_2} \right|^2 \quad (2-20)$$

$$\tau_{12}(\mu_1) = \frac{4 Z_1 Z_2 \mu_1 \mu_2}{(Z_1 \mu_1 + Z_2 \mu_2)^2} \quad (2-21)$$

其中  $\mu_i$  為方向餘弦， $Z_i = \rho_i v_i$  為材料的聲阻抗 (Acoustic impedance)， $\rho$  為材料密度 (Density)， $v$  為材料聲子群速。以上 (2-19) 和 (2-20) 兩式僅被限制在彈性散射過程 (Elastic scattering process) 中適用，即穿透與反射的聲子頻率和入射聲子頻率相同，不因碰撞發生改變，因此符合下列關係式：

$$R_{21}(\mu_2) = R_{12}(\mu_1) \quad (2-22)$$

$$\tau_{21}(\mu_2) = \tau_{12}(\mu_1) \quad (2-23)$$

過去的研究指出[33] AMM 模式的預測只有在極低溫度下符合實驗結果，隨著溫度的上升，聲子物質波波長的縮小進而接近界面粗糙度時，使得散射效應不得不加以考慮，故不適合處理高溫系統。

1998 年 Chen [13]進一步考慮非彈性散射過程 (Inelastic scattering process)，入射角與折射角不再服從 Snell's Law，而是遵循以下之關係式：

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \left( \frac{C_2 v_2}{C_1 v_1} \right)^{1/2} \quad (2-24)$$

且在極低溫系統下，比熱  $C$  正比於  $v^{-3}$ ，和彈性散射過程的 AMM 模式一致。

### 2.3.2 散異理論模式

散異理論模式 (Diffuse mismatch model、簡稱 DMM) 是由 Swartz 等人[32]於 1989 年提出，和 AMM 模式不同，考慮聲子在界面處發生無方向性散射，假設聲子經過界面時會忘記原有軌跡，即聲子在界面處分不清楚前一刻的自己是經由穿透還是反射過程而來，因此穿透率及反射率符合下述關係式：

$$\tau_{12} = R_{21} = 1 - \tau_{21} \quad (2-25)$$

並假設聲子受到細緻平衡 (Detail balance) 的限制，單位時間，單位體積下，擁有相同能量  $\hbar\omega$  的聲子，離開介質 1 的聲子數目必須等於離開介質 2 的聲子數目：

$$\sum_m v_{1m} N_{1m}(\omega, T) \tau_{12}(\omega) = \sum_m v_{2m} N_{2m}(\omega, T) \tau_{21}(\omega) \quad (2-26)$$

其中  $v_{im}$  是在  $i$  介質某模態 (Mode) 下聲子的行進速度，模態  $m$  有橫向 (Transverse) 和縱向 (Longitudinal) 兩種， $N_{im}$  則是在相同溫度下  $i$  介質中單位體積聲子的數量。利用 (2-25)，且在德拜近似 (Debye approximation) 下得到穿透率的表示式如下：

$$\tau_{12} = \frac{\sum_m v_{2m}^{-2}}{\sum_m v_{1m}^{-2} + \sum_m v_{2m}^{-2}} \quad (2-27)$$



由於德拜近似在溫度升高時不適用，於是 1998 年 Chen [13] 另外由 (2-15) 式且假設系統中溫度變化不大以致於比熱可視為一常數，得到強度與比熱之間的關係如下：

$$I_0 = \frac{\nu C(T - T_{ref})}{4\pi} \quad (2-28)$$

假設界面兩邊處於相同溫度，遵守能量守恆，可導得穿透率的表示式如下：

$$\tau_{12} = \frac{C_2 v_2}{C_1 v_1 + C_2 v_2} \quad (2-29)$$

此推導過程中，假設所有頻率的聲子均能穿透界面，暗示著界面為非彈性散射，故此為非彈性散射理論模式（Inelastic diffuse mismatch model）。

### 2.3.3 散射聲異理論模式

散射聲異理論模式（Scattering-mediated acoustic mismatch model、簡稱 SMAMM）是 2001 年由 Prasher 和 Phelan [34] 比較 EPRT 和 ERT 的不同處，進一步修正 AMM 模式而提出的。他們認為除了 AMM 模式指出吸收造成的界面熱阻外，仍有散射效應造成的界面熱阻需考慮。



$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{1}{\vartheta} \frac{dy}{dt} = \frac{d^2 y}{dx^2} \quad (2-30)$$

由上述波動方程式 (2-30) 求解波函數，其中  $\vartheta$  為阻尼係數，單位為秒，重新定義一等效速度（Effective velocity） $\tilde{v}$  如下：

$$\tilde{v} = \frac{v}{\left(1 + \frac{i}{\vartheta \omega}\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{v}{a' + ib'} \quad (2-31)$$

其中

$$g = \frac{\tau}{\sqrt{1 + \left(\frac{1}{2\tau\omega}\right)^2}} \quad (2-32)$$

$$a' = \sqrt{1 + \left(\frac{1}{2\tau\omega}\right)^2}, \quad b' = \frac{1}{2\tau\omega} \quad (2-33)$$

入射角與折射角依然遵循 Snell's Law

$$\tilde{v}_1 \sin \theta_2 = \tilde{v}_2 \sin \theta_1 \quad (2-34)$$

將折射角  $\theta_2$  以入射角  $\theta_1$  表示

$$\frac{\cos \theta_2}{\tilde{v}_2} = \sqrt{\left(\frac{1}{\tilde{v}_2}\right)^2 - \left(\frac{1}{\tilde{v}_1}\right)^2 \sin^2 \theta_1} \quad (2-35)$$


則 SMAMM 的穿透率及反射率如下表示：

$$R(\theta_1) = \frac{\left[ \frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a'_1 - \frac{A}{\rho_2} \right]^2 + \left[ \frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a'_1 + \frac{B}{\rho_2} \right]^2}{\left[ \frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a'_1 + \frac{A}{\rho_2} \right]^2 + \left[ \frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a'_1 - \frac{B}{\rho_2} \right]^2} \quad (2-36)$$

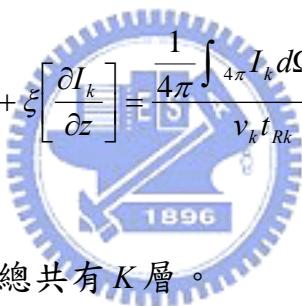
$$\tau(\theta_1) = 1 - R(\theta_1) \quad (2-37)$$

其中 A 和 B 分別是 (2-35) 式的實數和虛數部分。

## 2.4 多層二維圓柱聲子輻射熱傳分析

### 2.4.1 多層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式

由於我們欲分析的結構為超晶格奈米線，屬於層狀結構。因此將 2.2 節所推導的單層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式推廣至多層結構，如圖 2-3 所示之物理模型圖。而超晶格奈米線組成的順序是兩種材料週期性的重複出現，奇數層的厚度用  $L_o$  表示，偶數層的厚度則用  $L_e$  表示。每一層二維圓柱皆可視為一單層二維圓柱系統，適用 2.2 節所導出的方程式，如下所示：

$$\frac{\mu}{r} \left[ \frac{\partial(rI_k)}{\partial r} \right] - \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial(\eta I_k)}{\partial \phi} \right] + \xi \left[ \frac{\partial I_k}{\partial z} \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_k d\Omega - I_k}{\nu_k t_{Rk}} \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (2-38)$$


其中下標  $k$  代表第  $k$  層，總共有  $K$  層。

### 2.4.2 多層二維圓柱座標系統之邊界條件

多層結構除了單層結構內部熱傳現象的分析外，需把層與層之間形成的界面所造成的熱阻加以考慮。因此在第  $k$  層與第  $k+1$  層的交界面處，我們使用能量守恆的概念來處理：

$$\int_{2\pi} I_k^- d\Omega = \int_{2\pi} R_{k,k+1} I_k^+ d\Omega + \int_{2\pi} \tau_{k+1,k} I_{k+1}^- d\Omega \quad (2-39)$$

$$\int_{2\pi} I_{k+1}^+ d\Omega = \int_{2\pi} R_{k+1,k} I_{k+1}^- d\Omega + \int_{2\pi} \tau_{k,k+1} I_k^+ d\Omega \quad (2-40)$$

其中  $I$  的上標  $+$  表示往正方向的聲子強度， $-$  表示往相反方向的聲子強度，下標  $k$  和  $k+1$  分別代表第  $k$  層及第  $k+1$  層的聲子強度，如  $I_k^+$  是指第  $k$  層往前方向的聲子強度。 $R_{k,k+1}$ 、 $R_{k+1,k}$  分別代表聲子從第  $k$  層進入第  $k+1$  層以及從第  $k+1$  層進入第  $k$  層的反射率， $\tau_{k,k+1}$ 、 $\tau_{k+1,k}$  分別代表聲子從第  $k$  層進入第  $k+1$  層以及從第  $k+1$  層進入第  $k$  層的穿透率。

其他邊界條件如前述 2.2.2 節相同，上下兩界面的定溫邊界如下：

$$I_1 = I^0(T_b) \quad z = 0 \quad (2-41a)$$

$$I_K = I^0(T_t) \quad z = L \quad (2-41b)$$

圓周上的定溫邊界條件如下：

$$I_k = I^0(T_c) \quad r = R \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (2-42)$$

中央軸對稱邊界條件如下：

$$I_k(r = 0^+) = I_k(r = 0^-) \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (2-43)$$

## 2.5 聲子平均自由徑的修正

由前述 2-2 節所導出的二維圓柱座標聲子輻射熱傳方程式中可以知道，當我們利用此一理論模擬半導體材料的熱傳導係數時，需要三個材料參數：材料比熱、聲子群速以及聲子平均自由徑。其中聲子平均自由徑的估算主要有兩種方式。其一，從微觀的角度出發，考量各

種聲子散射機制如：聲子本身的散射過程 ( $\Lambda_{ph-ph}$ )、材料中存在缺陷造成聲子散射 ( $\Lambda_{defect}$ )、邊界造成的散射 ( $\Lambda_{bound}$ ) 及聲子和電子間的散射過程 ( $\Lambda_{ph-e}$ )。利用 Matthiessen's rule 計算而得到。當所考量的聲子散射機制越多，就能得到越準確得平均自由徑，但相對上所付出的代價也就越大。且目前對於實際聲子散射機制的掌握仍不夠完善，如此大費周章是否有其價值還需證實。其二，以古典 Kinetic theory 為基礎，利用塊材（巨觀）下得到的材料比熱以及聲子群速，回求聲子平均自由徑 ( $\Lambda_{bulk}$ )，相較於前述較為簡單且易於獲得。但當材料尺寸接近或甚至小於聲子平均自由徑時，聲子在邊界發生散射的機會將遠大於材料內部。另外，前人文獻[21,23,24]也提到，在奈米線及超晶格奈米線中，邊界散射機會的增加是造成其熱傳導係數降低的主要原因之一。因此，評估本文所用的微觀熱傳理論做以下幾點假設：

1. 材料內部不存在缺陷。
2. 假設電子和聲子間無相互作用。
3. 模擬溫度約在 300K 或以下，忽略非彈性散射效應。
4. 假設聲子鬆弛時間和頻率無關。

利用 Matthiessen's rule，結合聲子在材料內部及邊界上的散射效應修正平均自由徑，如下式，得到一等效聲子平均自由徑：

$$\frac{1}{\Lambda_{effect}} = \frac{1}{\Lambda_{bulk}} + \frac{1}{L} + \frac{1}{R} \quad (2-44)$$

其中的  $L$  為材料厚度， $R$  為材料半徑。本文大膽啟用兩個物理幾何尺寸，是由微觀下的聲子散射情形聯想而來，認為當材料尺寸縮小至與聲子平均自由徑相當時，邊界將會大大地影響聲子散射，故直接選用材料尺寸修正聲子平均自由徑。

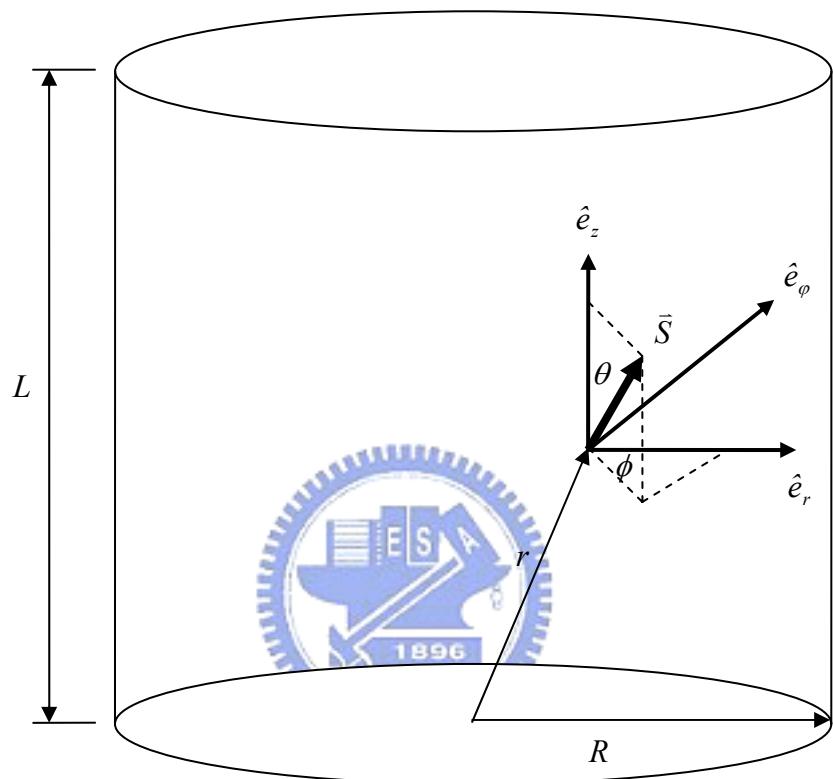


圖 2-1 二維圓柱座標系統

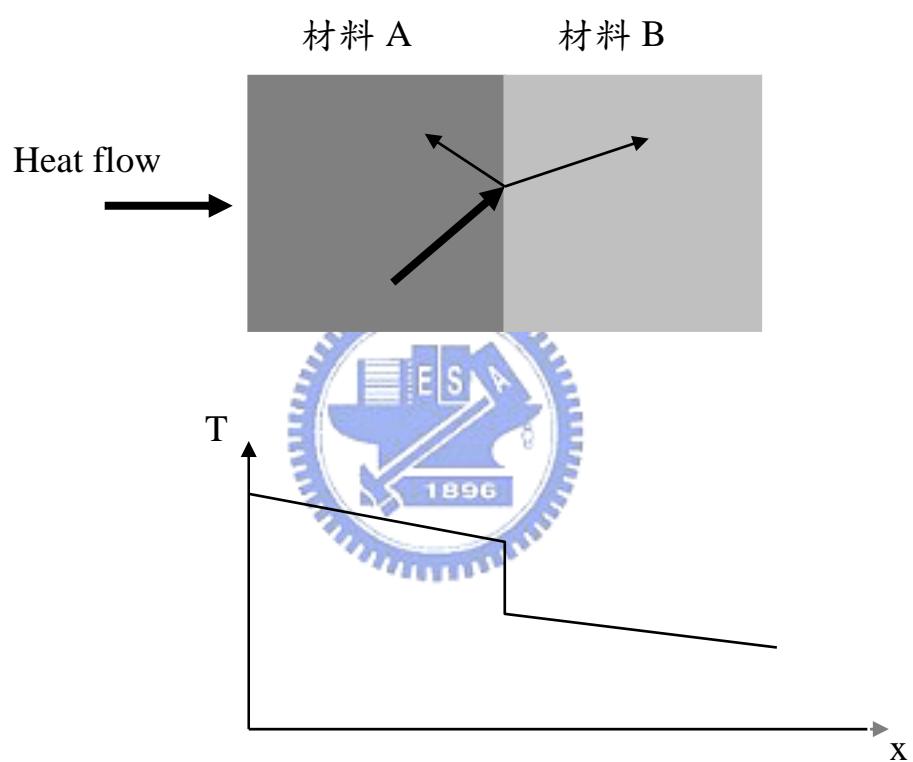


圖 2-2 界面熱阻示意圖

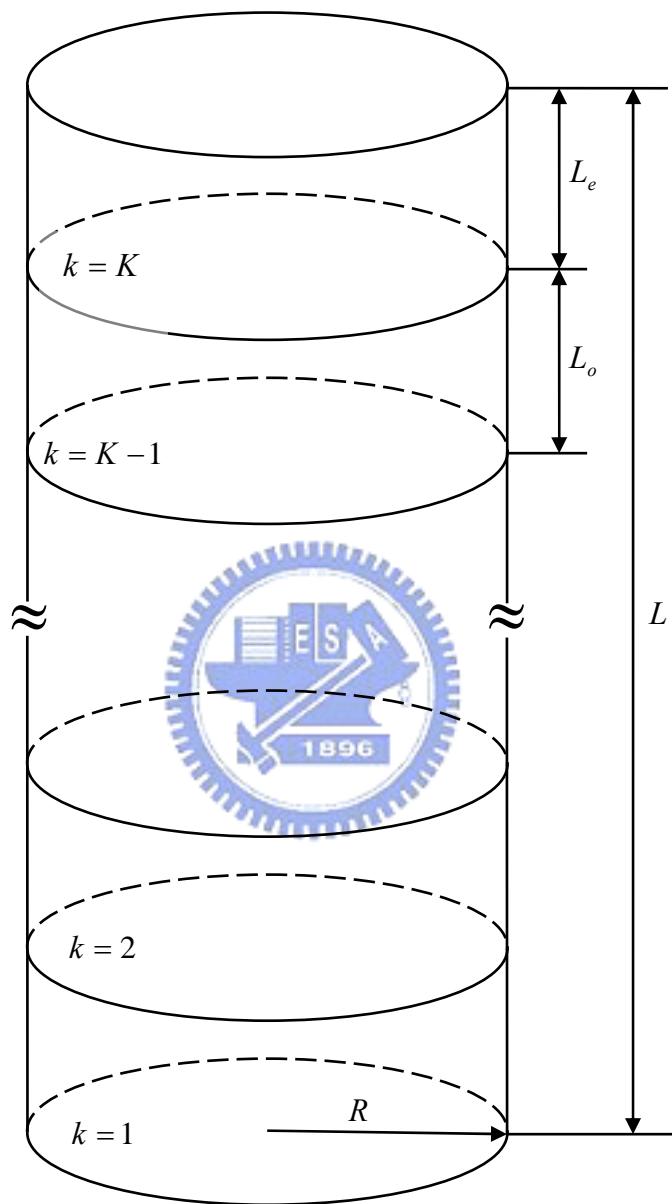


圖 2-3 多層二維圓柱座標系統

### 三、數值分析

#### 3.1 $S_N$ 近似法

由於我們所處理的方程式如 (2-14) 式，為一積微分方程式 (Integral-differential equation)，為了便於解釋，僅先處理單層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式。本文採用  $S_N$  近似法 [36] (又稱 The discrete ordinate method) 將聲子輻射強度對立體角 (Solid angle) 的積分以  $N$  個分量相加近似，且每一個分量必須乘上所對應的權重因子 (Quadrature weights)，如下：

$$\int_{4\pi} Id\Omega = \sum_{m=1}^N w_m I_m$$



(3-1)

其中下標  $m$  表示不同方向， $w_m$  為第  $m$  個方向對應的權重函數。將 (3-1) 式代入方程式 (2-14) 式，可得到  $N$  個微分方程式：

$$\frac{\mu_m}{r} \left[ \frac{\partial(rI_m)}{\partial r} \right] - \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial(\eta_m I_m)}{\partial \phi} \right]_{\phi=\phi_m} + \xi_m \left[ \frac{\partial I_m}{\partial z} \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_m - I_m}{vt_R} \quad m = 1, 2, \dots, N$$

(3-2)

由於方向餘弦  $\phi_m$  (Directional cosine) 是離散的，利用中央差分法 (Central differences scheme) 處理左邊第二項，其示意圖如圖 3-1。

$$\left[ \frac{\partial(\eta_m I_m)}{\partial \phi} \right]_{\phi=\phi_m} = \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} I_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} I_{m-\frac{1}{2}}}{w_m} \quad m = 1, 2, \dots, N$$

(3-3)

其中

$$I_{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(I_m + I_{m+1}) \quad (3-4)$$

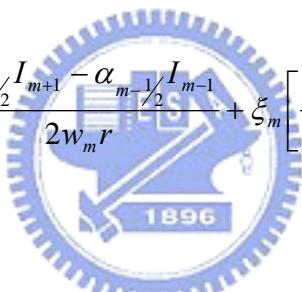
$$I_{m-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(I_{m-1} + I_m) \quad (3-5)$$

$$\alpha_{\frac{1}{2}} = 0 \quad (3-6)$$

$$\alpha_{m+\frac{1}{2}} = \alpha_{m-\frac{1}{2}} + w_m \mu_m \quad (3-7)$$

將 (3-3)、(3-4)、(3-5)、(3-6)、(3-7) 代入 (3-2) 式可得：

$$\mu_m \left[ \frac{\partial I_m}{\partial r} \right] + \frac{\mu_m}{2r} I_m - \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} I_{m+1} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} I_{m-1}}{2w_m r} + \xi_m \left[ \frac{\partial I_m}{\partial z} \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_m - I_m}{vt_R} \quad (3-8)$$



其中對應所需使用的方向餘弦及權重函數參考表 3-1 [35]。

## 3.2 多層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式之數值解

在處理完積分項之後，得到一聯立微分方程組，如上 (3-8) 式。微分項則利用有限差分法 (Finite difference method) 分解，由於是二維系統，故分成四個象限分別處理。第一象限 ( $\mu > 0$ 、 $\xi > 0$ ) 在徑向及軸向皆使用後差分 (Backward difference scheme) 處理；第二象限 ( $\mu < 0$ 、 $\xi > 0$ ) 在徑向使用前差分 (Forward difference scheme) 處理，軸向則使用後差分處理；第三象限 ( $\mu < 0$ 、 $\xi < 0$ ) 在徑向及軸

向皆使用前差分處理；第四象限 ( $\mu_m > 0, \xi_m < 0$ ) 在徑向使用後差分，軸向使用前差分處理。

第一象限 ( $\mu_m > 0, \xi_m > 0$ )

$$\begin{aligned} & \mu_m \frac{I_{m,i,j} - I_{m,i-1,j}}{\Delta r} + \frac{\mu_m}{2r} - \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \xi_m \frac{I_{m,i,j} + I_{m,i,j-1}}{\Delta z} \\ &= \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} - I_{m,i,j}}{vt_R} \end{aligned} \quad (3-9)$$

將 (3-9) 式移項整理可得 (3-10) 式

$$I_{m,i,j} = \frac{1}{\mu_m \sqrt{\Delta r} + \mu_m \sqrt{2r} + \xi_m \sqrt{\Delta z} + \sqrt{vt_R}} \times \left[ \frac{\mu_m}{\Delta r} I_{m,i-1,j} + \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,i,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} \right] \quad (3-10)$$

第二象限 ( $\mu_m < 0, \xi_m > 0$ )

$$\begin{aligned} & \mu_m \frac{I_{m,i+1,j} - I_{m,i,j}}{\Delta r} + \frac{\mu_m}{2r} - \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \xi_m \frac{I_{m,i,j} + I_{m,i,j-1}}{\Delta z} \\ &= \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} - I_{m,i,j}}{vt_R} \end{aligned} \quad (3-11)$$

將 (3-11) 式移項整理可得 (3-12) 式

$$\begin{aligned}
I_{m,i,j} = & \frac{1}{-\mu_m \frac{1}{\Delta r} + \mu_m \frac{1}{2r} + \xi_m \frac{1}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R}} \times \\
& \left[ -\frac{\mu_m}{\Delta r} I_{m,i+1,j} + \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,i,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} \right]
\end{aligned} \tag{3-12}$$

第三象限 ( $\mu_m < 0$  、  $\xi_m < 0$ )

$$\begin{aligned}
& \mu_m \frac{I_{m,i+1,j} - I_{m,i,j}}{\Delta r} + \frac{\mu_m}{2r} - \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \xi_m \frac{I_{m,i,j+1} + I_{m,i,j}}{\Delta z} \\
& = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} - I_{m,i,j}}{vt_R}
\end{aligned} \tag{3-13}$$

將 (3-13) 式移項整理可得 (3-14) 式

$$\begin{aligned}
I_{m,i,j} = & \frac{1}{-\mu_m \frac{1}{\Delta r} + \mu_m \frac{1}{2r} - \xi_m \frac{1}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R}} \times \\
& \left[ -\frac{\mu_m}{\Delta r} I_{m,i+1,j} + \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} - \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,i,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} \right]
\end{aligned} \tag{3-14}$$

第四象限 ( $\mu_m > 0$  、  $\xi_m < 0$ )

$$\begin{aligned}
& \mu_m \frac{I_{m,i,j} - I_{m,i-1,j}}{\Delta r} + \frac{\mu_m}{2r} - \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} + \xi_m \frac{I_{m,i,j+1} + I_{m,i,j}}{\Delta z} \\
& = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} - I_{m,i,j}}{vt_R}
\end{aligned} \tag{3-15}$$

將 (3-15) 式移項整理可得 (3-16) 式

$$I_{m,i,j} = \frac{1}{\mu_m \frac{1}{\Delta r} + \mu_m \frac{1}{2r} - \xi_m \frac{1}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R}} \times \left[ \frac{\mu_m}{\Delta r} I_{m,i-1,j} + \frac{\alpha_{m+1/2} I_{m+1,i,j} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1,i,j}}{2w_m r} - \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,i,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,i,j} \right] \quad (3-16)$$

其中  $I_{m,i,j}$  代表徑向第  $i$  個、軸向第  $j$  個格點在第  $m$  個餘弦方向的聲子輻射強度， $i = 0, 1, 2, \dots, N_i$ ， $j = 0, 1, 2, \dots, N_j$ 。於是利用上述所得 (3-10)、(3-12)、(3-14) 及 (3-16) 式的代數方程式處理二維圓柱座標系統的熱傳問題。但由於出現  $\frac{1}{r}$  項，在中心軸 ( $r = 0$ ) 無法使用上述四條方程式，我們針對中心軸另外處理。

回到 (2-11) 式。穩態時，聲子輻射強度對時間微分項為 0，且在灰體假設下，聲子輻射強度與頻率無關，可得下式：

$$\mu \frac{\partial I}{\partial r} - \frac{\eta}{r} \frac{\partial I}{\partial \phi} + \xi \frac{\partial I}{\partial z} = \frac{I^0 - I}{vt_R} \quad (3-17)$$

將 (3-17) 式同乘  $r$ ，在  $r = 0$  得到：

$$\eta \left. \frac{\partial I}{\partial \phi} \right|_{r=0} = 0 \quad (3-18)$$

再回到 (3-17) 式，當  $r = 0$  時，左邊第二項出現  $\frac{0}{0}$ ，因此使用 L'Hospital

rule, 可得如下方程式：

$$\begin{aligned}
 & \frac{3\mu_m}{2} \left[ \frac{\partial I_m}{\partial r} \right] - \left[ \frac{\alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial I_{m+1}}{\partial r} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( \frac{\partial I_{m-1}}{\partial r} \right)}{2w_m} \right] \\
 & + \xi_m \left[ \frac{\partial I_m}{\partial z} \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_m - I_m}{vt_R} \tag{3-19}
 \end{aligned}$$

故利用 (3-19) 式處理中央軸 ( $r=0$ , 即  $i=0$ ) 的情況, 一樣分成四個象限使用有限差分處理微分項。

第一象限 ( $\mu_m > 0$  、  $\xi_m > 0$ )

$$\begin{aligned}
 & \frac{3\mu_m}{2} \frac{I_{m,0,j} - I_{m,-1,j}}{\Delta r} + \xi_m \frac{I_{m,0,j} - I_{m,0,j-1}}{\Delta z} \\
 & - \frac{1}{2w_m} \left[ \alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m+1,0,j} - I_{m+1,-1,j}}{\Delta r} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m-1,0,j} - I_{m-1,-1,j}}{\Delta r} \right) \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} - I_{m,0,j}}{vt_R} \tag{3-20}
 \end{aligned}$$

將 (3-20) 式移項整理可得 (3-21) 式

$$\begin{aligned}
 I_{m,0,j} &= \frac{1}{3\mu_m \left/ \right. 2\Delta r + \xi_m \left/ \right. \Delta z + \left/ \right. vt_R} \times \\
 & \left[ \frac{3\mu_m}{2\Delta r} I_{m,-1,j} + \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,0,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2w_m \Delta r} \left( \alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( I_{m+1,0,j} - I_{m+1,-1,j} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( I_{m-1,0,j} - I_{m-1,-1,j} \right) \right) \right] \tag{3-21}
 \end{aligned}$$

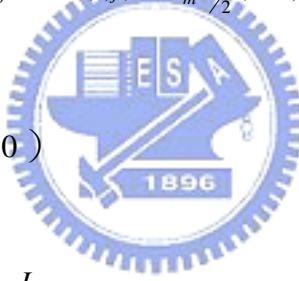
第二象限 ( $\mu_m < 0$  、  $\xi_m > 0$ )

$$\begin{aligned}
& \frac{3\mu_m}{2} \frac{I_{m,1,j} - I_{m,0,j}}{\Delta r} + \xi_m \frac{I_{m,0,j} - I_{m,0,j-1}}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2w_m} \left[ \alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m+1,1,j} - I_{m+1,0,j}}{\Delta r} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m-1,1,j} - I_{m-1,0,j}}{\Delta r} \right) \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} - I_{m,0,j}}{vt_R}
\end{aligned} \tag{3-22}$$

將 (3-22) 式移項整理可得 (3-23) 式

$$\begin{aligned}
I_{m,0,j} &= \frac{1}{-\frac{3\mu_m}{2\Delta r} + \frac{\xi_m}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R}} \times \\
& \left[ -\frac{3\mu_m}{2\Delta r} I_{m,1,j} + \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,0,j-1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} \right. \\
& \left. + \frac{1}{2w_m \Delta r} \left( \alpha_{m+\frac{1}{2}} (I_{m+1,1,j} - I_{m+1,0,j}) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} (I_{m-1,1,j} - I_{m-1,0,j}) \right) \right] \tag{3-23}
\end{aligned}$$

第三象限 ( $\mu_m < 0$  、  $\xi_m < 0$ )



$$\begin{aligned}
& \frac{3\mu_m}{2} \frac{I_{m,1,j} - I_{m,0,j}}{\Delta r} + \xi_m \frac{I_{m,0,j+1} - I_{m,0,j}}{\Delta z} \\
& - \frac{1}{2w_m} \left[ \alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m+1,1,j} - I_{m+1,0,j}}{\Delta r} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m-1,1,j} - I_{m-1,0,j}}{\Delta r} \right) \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} - I_{m,0,j}}{vt_R}
\end{aligned} \tag{3-24}$$

將 (3-24) 式移項整理可得 (3-25) 式

$$I_{m,0,j} = \frac{1}{-\frac{3\mu_m}{2\Delta r} - \frac{\xi_m}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R} \times \left[ -\frac{3\mu_m}{2\Delta r} I_{m,1,j} - \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,0,j+1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} + \frac{1}{2w_m \Delta r} \left( \alpha_{m+\frac{1}{2}} (I_{m+1,1,j} - I_{m+1,0,j}) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} (I_{m-1,1,j} - I_{m-1,0,j}) \right) \right]} \quad (3-25)$$

第四象限 ( $\mu_m > 0$  、  $\xi_m < 0$  )

$$\frac{3\mu_m}{2} \frac{I_{m,0,j} - I_{m,-1,j}}{\Delta r} + \frac{\xi_m}{\Delta z} \frac{I_{m,0,j+1} - I_{m,0,j}}{\Delta z} - \frac{1}{2w_m} \left[ \alpha_{m+\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m+1,0,j} - I_{m+1,-1,j}}{\Delta r} \right) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \left( \frac{I_{m-1,0,j} - I_{m-1,-1,j}}{\Delta r} \right) \right] = \frac{\frac{1}{4\pi} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} - I_{m,0,j}}{vt_R} \quad (3-26)$$

將 (3-26) 式移項整理可得 (3-27) 式

$$I_{m,0,j} = \frac{1}{\frac{3\mu_m}{2\Delta r} - \frac{\xi_m}{\Delta z} + \frac{1}{vt_R} \times \left[ \frac{3\mu_m}{2\Delta r} I_{m,-1,j} - \frac{\xi_m}{\Delta z} I_{m,0,j+1} + \frac{1}{4\pi vt_R} \sum_{m=1}^N w_m I_{m,0,j} + \frac{1}{2w_m \Delta r} \left( \alpha_{m+\frac{1}{2}} (I_{m+1,0,j} - I_{m+1,-1,j}) - \alpha_{m-\frac{1}{2}} (I_{m-1,0,j} - I_{m-1,-1,j}) \right) \right]} \quad (3-27)$$

其中  $I_{m,-1,j} = I_{m,1,j}$  °

將上述 (3-10)、(3-12)、(3-14)、(3-16)、(3-21)、(3-23)、(3-25) 及 (3-27) 式用於處理多層二維圓柱座標系統的熱傳分析求解，需要以下邊界條件：

$$I_{1,m} = I^0(T_b), z = 0, \xi_m > 0 \quad (3-28a)$$

$$I_{K,m} = I^0(T_t), z = L, \xi_m < 0 \quad (3-28b)$$

$$I_{k,m} = I^0(T_c), r = R, \mu_m < 0 \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (3-29)$$

中央軸對稱邊界條件

$$I_k(0, \mu_m, \xi_m) = I_k(0, -\mu_m, \xi_m) \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (3-30)$$

層與層之間的能量守恆邊界條件則使用 (2-39) 及 (2-40) 式。

由上述所得出之聯立代數方程式配合邊界條件，不斷的疊代之後，並設定一收斂條件使得前後兩次相減的誤差值在設定接受範圍內，即可得到聲子輻射強度分佈，如下所示：

$$|I_{step+1} - I_{step}| < error \quad (3-31)$$

其數值方法流程圖如圖 3-2。

接著可由平衡輻射強度與溫度的關係式 (2-15) 回推得到溫度分佈。並可由下式定義出軸向熱通量 (Heat flux)。

$$q_z = \sum_{m=1}^N \xi_m w_m I_m \quad (3-32)$$

為了和塊材材料比較熱傳導係數，我們由傅立葉傳導定律定義一軸向等效熱傳導係數 (Effective thermal conductivity) 如下：

$$k_{z, \text{effect}} = q_z \frac{\Delta z}{\Delta T} \quad (3-33)$$

多層二維圓柱結構內部總界面熱阻 (Interface thermal resistance,  $R_I$ ) 的計算是將層與層之間因界面熱阻造成的溫差全部相加，除以熱通量，如下所示：

$$R_I = \frac{\sum_{k=1}^{K-1} \Delta T_k}{q_z} \quad (3-34)$$

其中  $k = 1 \sim K - 1$ ，因為  $K$  層有  $K - 1$  個界面。計算總熱阻 (Total thermal resistance,  $R_T$ ) 是由系統邊界的溫度差除以熱通量，如下：

$$R_T = \frac{T_b - T_t}{q_z} \quad (3-35)$$



而因為材料本身所造成的材料熱阻 (Material resistance,  $R_M$ ) 則由總熱阻扣掉總界面熱阻得到：

$$R_M = R_T - R_I \quad (3-36)$$

本文計算上所需用到的材料參數值列於表 3-2[8,28]、3-3[13,37]。

### 3.3 數值方法之驗證

使用有限差分將統御方程式離散化之後，得到一代數方程式，為了避免所選取的格點數對本文的結果造成影響，使用此數值方法前，

必須先做格點測試的工作。一般狀況下，所選取的格點數越多，將預計算的區域分的越精細，得到的結果將越精準，但相對來說，電腦必須花較多的時間來計算。不影響計算結果的前提下，為了節省運算時間，找出一組最合適的格點數，此為格點測試的主要目的。

圖 3-3 為單層二維圓柱在室溫穩態定溫邊界條件下，半徑和厚度皆為十倍平均自由徑時軸向溫度分佈的格點測試結果，所選用的材料為鑽石（Diamond）。分別選用  $21 \times 21$ 、 $31 \times 31$ 、 $41 \times 41$  及  $51 \times 51$  四組格點數作比較，由圖中結果發現，格點數對於軸向溫度分佈的影響不大。考量程式的精確度以及節省電腦計算時間，本文選用  $41 \times 41$  這組格點數來計算接下來的所有問題。

圖 3-4 為單層二維鑽石圓柱在室溫穩態定溫邊界條件下，半徑為一萬倍平均自由徑時的溫度分佈圖。將半徑放大到一萬倍平均自由徑是為了使二維圓柱系統近似為一維平板，結果和 1993 年 Majumdar [8] 的鑽石薄膜比較是一致的，因此可以確定本文所採用的數值方法是正確的。由圖中結果發現，邊界處存在一溫度不連續的現象，這是由於聲子在界面處尚未達到局部熱平衡所造成的，此為微觀熱傳特有的現象，巨觀傳立葉傳導定律無法解釋此一現象。另外，邊界上的溫差隨著厚度的縮小越來越明顯，厚度為 0.1 微米時出現類似子彈的穿透效應（ballistic）。

圖 3-5 為雙層矽/鎢二維圓柱在穩態定溫邊界條件下，其熱傳導係數隨著厚度變化的分佈圖。半徑為 10 微米時，雙層二維圓柱系統可視為雙層平板薄膜，應用 1998 年 Chen [13] 提出的非彈性散異理論模式（Inelastic DMM）處理界面問題，並與其結果比較，圖中顯示和 Chen 的結果是吻合的，因此可以確定本文在界面處所做的數值計算是正確的。矽/鎢雙層平板薄膜的熱傳導係數隨著厚度的縮小而降

低，驗證了尺寸效應的確大幅降低其熱傳導係數。圖中也發現當尺寸增加到某一厚度以上時，熱傳導係數將趨近於同材料的塊材值。而圖 3-6 為此情況下的溫度分佈情形，週期厚度分別由 1000 奈米一路降低至 100 奈米，探討不同週期厚度下的熱傳行為。可以由圖中發現雙層矽/鋒平板薄膜的溫度分佈如同單層鑽石薄膜（圖 3-4），受到尺寸效應的影響，週期厚度越小時，兩邊邊界處的溫度落差越明顯。另外，在矽鋒兩材料的交界面處，伴隨著界面熱阻的影響而出現明顯的溫度落差。



表 3-1 二維圓柱  $S_N$  方向餘弦和權重函數表[36]

	$\mu$	$\xi$	$W$
$S_2$	0.5	0.5	3.141592654
	-0.5	0.5	3.141592654
	0.5	-0.5	3.141592654
	-0.5	-0.5	3.141592654
$S_4$	0.2958759	0.9082483	1.047197533
	-0.2958759	0.9082483	1.047197533
	0.9082483	0.2958759	1.047197533
	0.2958759	-0.2958759	1.047197533
	-0.2958759	0.2958759	1.047197533
	-0.9082483	0.2958759	1.047197533
	0.9082483	-0.2958759	1.047197533
	0.2958759	-0.2958759	1.047197533
	-0.2958759	-0.2958759	1.047197533
	-0.9082483	-0.2958759	1.047197533
	0.2958759	-0.9082483	1.047197533
	-0.2958759	-0.9082483	1.047197533

表 3-2 室溫 (300K) 下材料的基本參數值[8,28]

	Diamond	Si	Ge
比熱 $C(\times 10^6 \text{ J/m}^3 \text{ K})$	1.81	0.926	0.866
聲速 $v(\text{m/s})$	12288	6084	3662
平均自由徑 $\Lambda(\text{nm})$	447	79	50
密度 $\rho(\text{kg/m}^3)$	3510	2329	5323
熱傳導係數 $k(\text{W/mK})$	3320	148	59.9
德拜溫度 $T_D(\text{K})$	1860	625	360

表 3-3 室溫 (300K) 下材料的基本參數值[13,37]

	GaAs	AlAs	$\text{Bi}_2\text{Te}_3$	$\text{Sb}_2\text{Te}_3$
比熱 $C(\times 10^6 \text{J/m}^3\text{K})$	1.71	1.58	1.22	1.338
聲速 $v(\text{m/s})$	3700	4430	3058	2888
平均自由徑 $\Lambda(\text{nm})$	20.8	37.7	0.482	0.466
密度 $\rho(\text{kg/m}^3)$	5318	3830	6505	7860
熱傳導係數 $k(\text{W/mK})$	56	84	0.6	0.6
德拜溫度 $T_D(\text{K})$	344	47	165	160

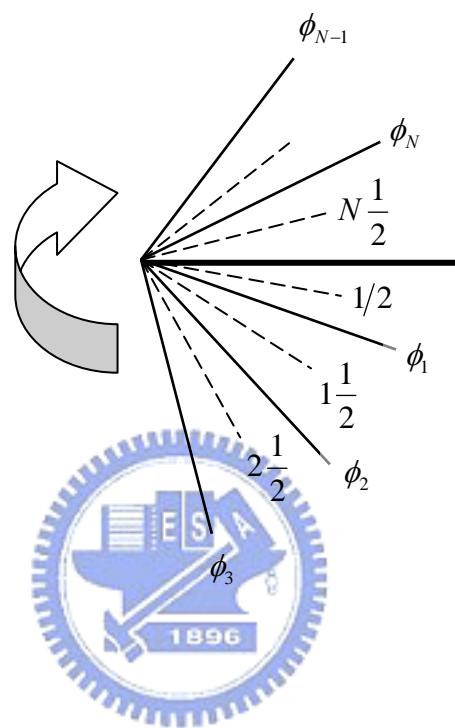


圖 3-1 方向餘弦離散示意圖

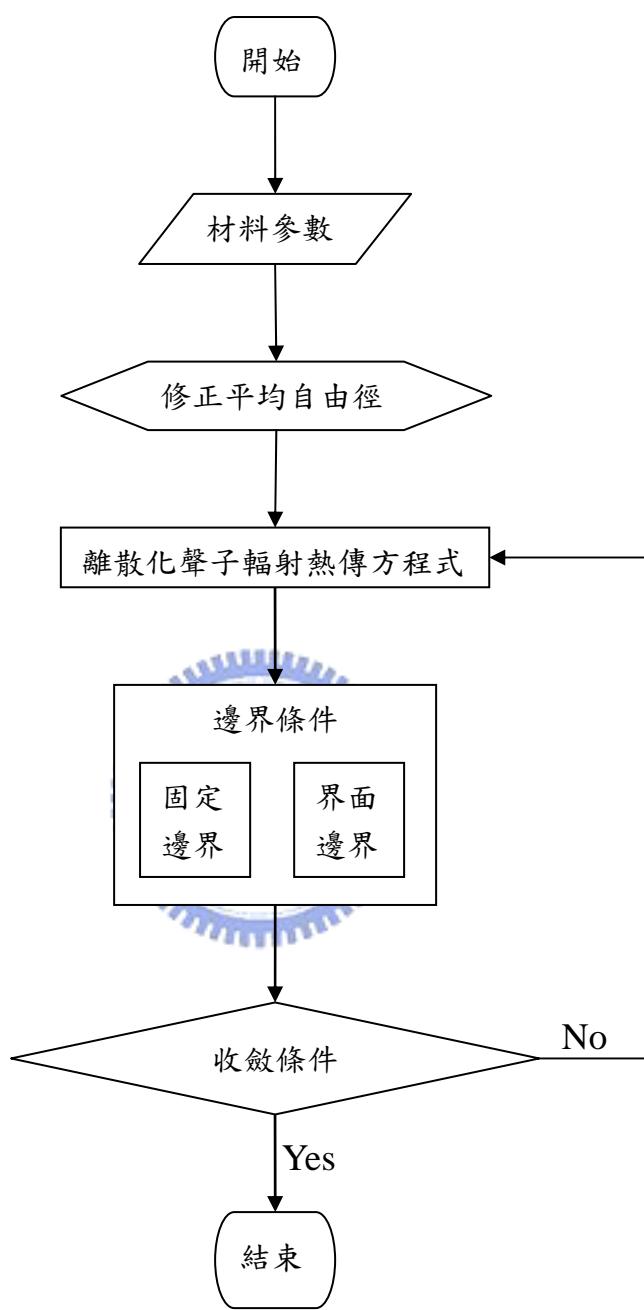


圖 3-2 數值方法流程圖

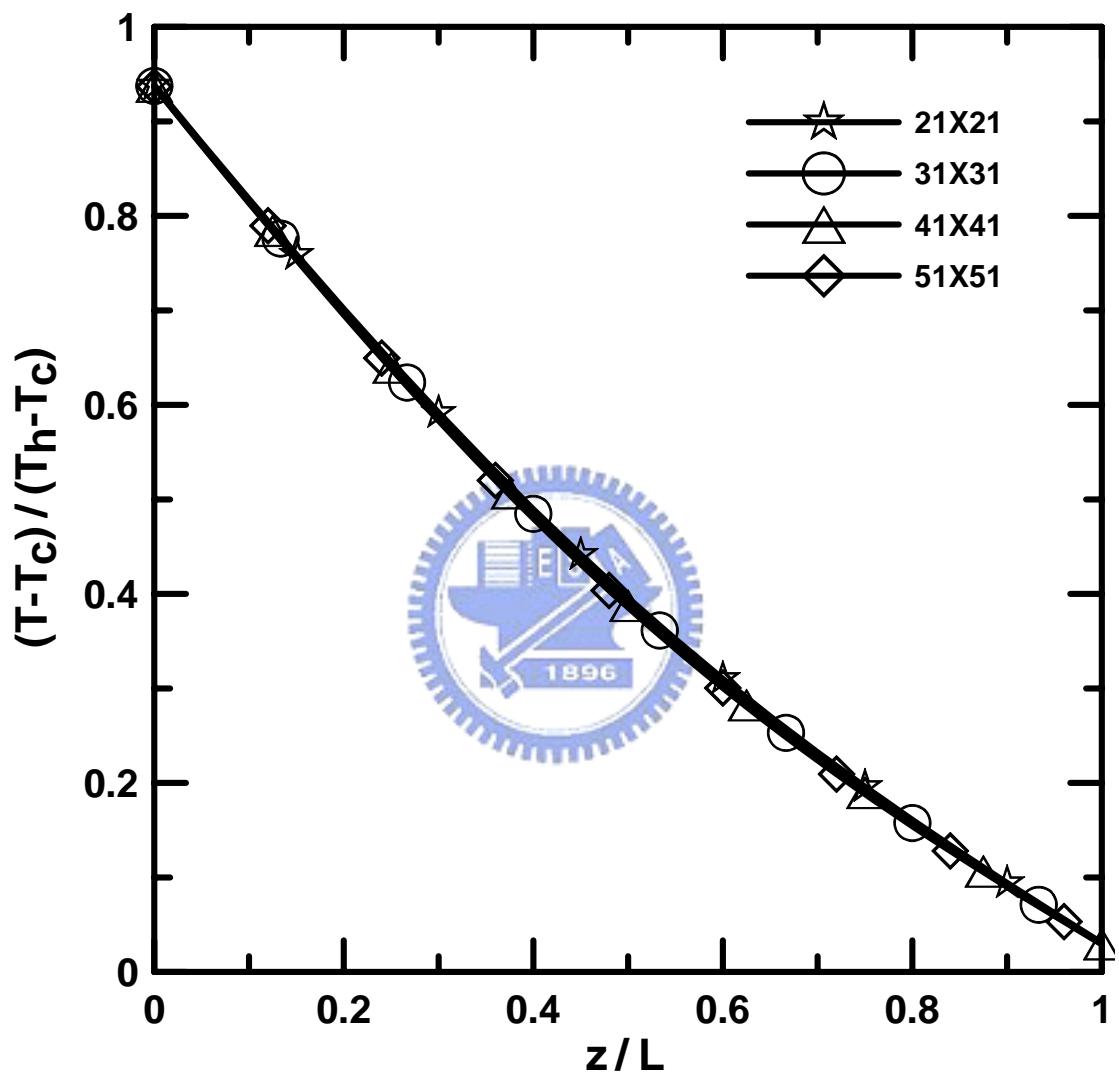


圖 3-3 單層二維圓柱座標格點測試圖

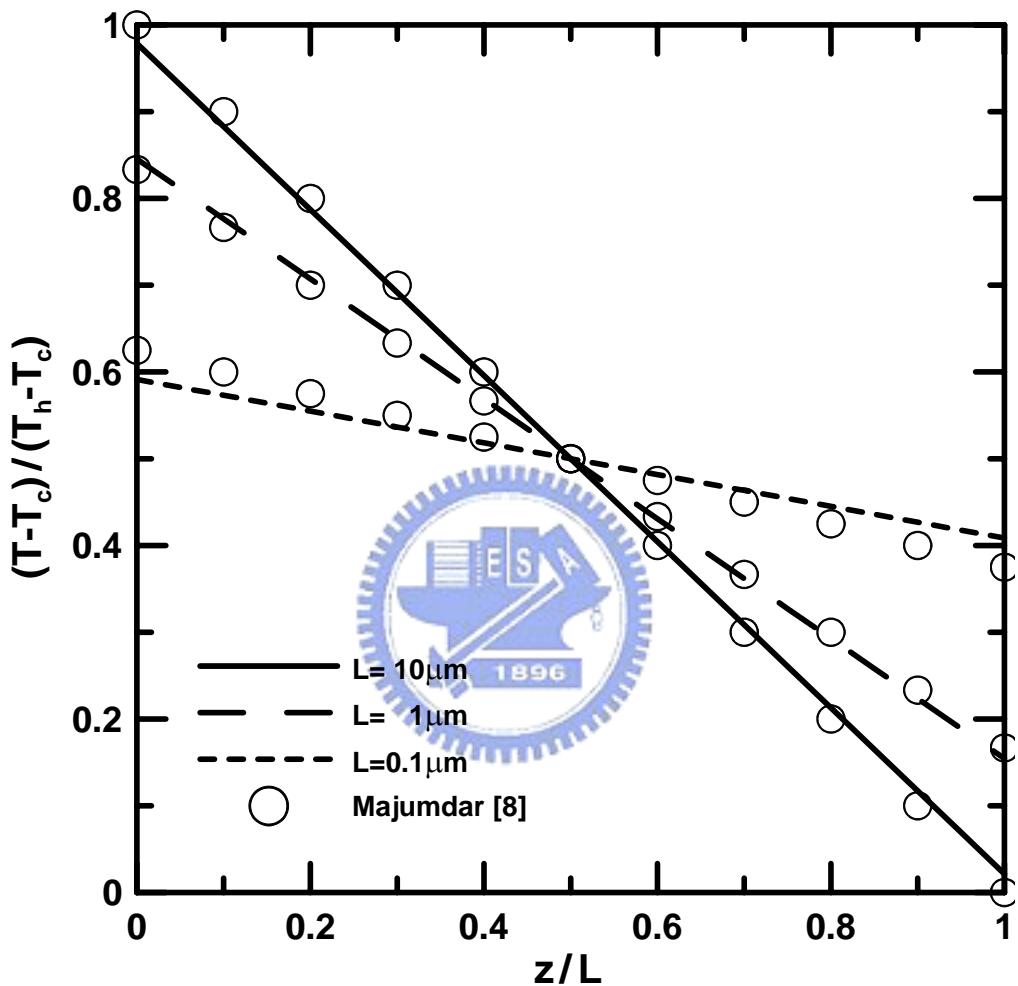


圖 3-4 半徑為 4.47mm 的單層 Diamond 二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，厚度分別為  $10 \mu\text{m}$ 、 $1 \mu\text{m}$  及  $0.1 \mu\text{m}$  的溫度分佈圖

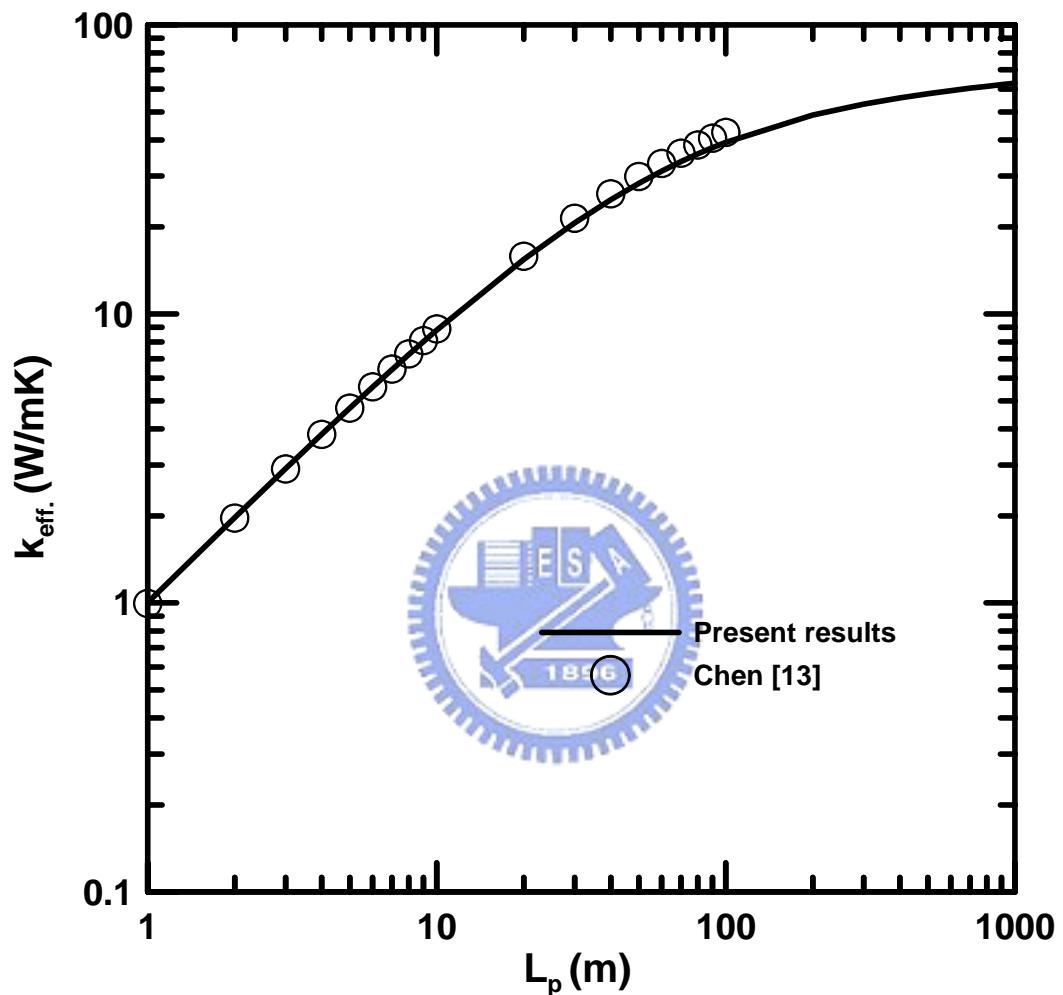


圖 3-5 半徑為  $10 \mu\text{m}$  的雙層 Si/Ge 二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對熱傳導係數的分佈圖

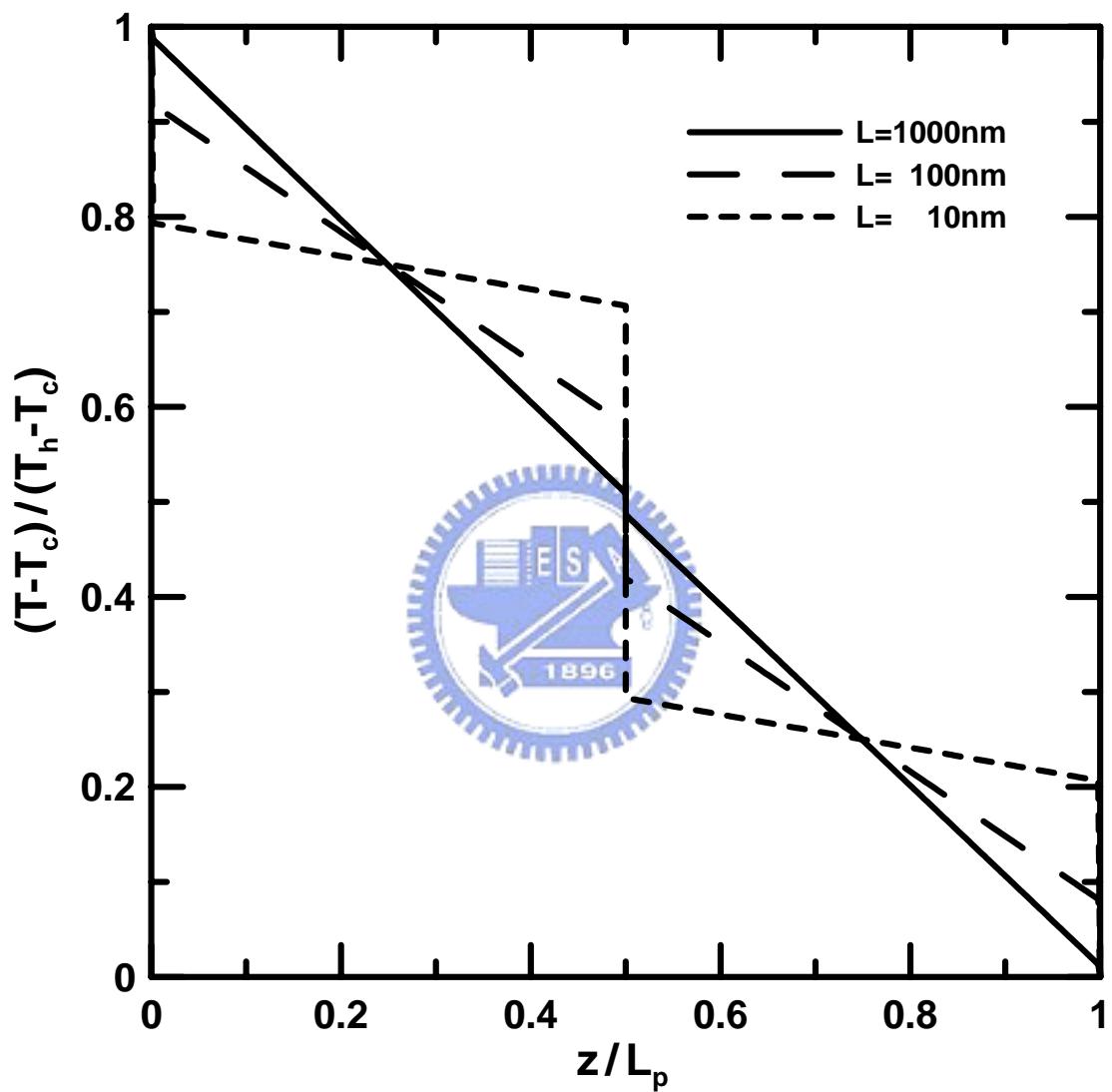


圖 3-6 半徑為  $10 \mu\text{m}$  的雙層 Si/Ge 二維圓柱，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為 1000nm、100nm 及 10nm 的溫度分佈圖

## 四、結果與討論

圖 4-1 利用單層二維圓柱聲子輻射熱傳方程式，配合定溫邊界條件，模擬室溫下矽奈米線到達穩態時，其半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖。矽奈米線的長度為 100nm，半徑由 100nm 縮小至 10nm，比較本文對聲子平均自由徑修正前後，對矽奈米線等效熱傳導係數造成的影响。使用修正過的聲子平均自由徑得到的模擬結果，相較於直接使用塊材下聲子平均自由徑的結果來的低，並和 Majumdar [20]在 2003 年利用微懸浮裝置量測的實驗值作比較，由此可見，聲子平均自由徑經由本文的修正後，對奈米線的等效熱傳導係數的模擬結果更加逼近實驗值，而徑向的尺寸效應也使得其等效熱傳導係數隨著半徑的縮小而降低。更進一步比較相同幾何尺寸下，平均自由徑修正前後對矽奈米線熱傳情形的影響。

圖 4-2 為長度及半徑皆為 100nm 時，比較採用(a)塊材時的平均自由徑和(b)本文因幾何尺寸修正的平均自由徑的溫度分佈圖。由矽奈米線內部的溫度分佈圖可以看出兩者有些許的不同，這是由於聲子平均自由徑為聲子傳遞能量的平均距離，經由平均自由徑的修正加入了尺寸對聲子傳遞能量所造成的影响，當尺寸縮的越小時，採用本文的修正前後差異越明顯。圖 4-3 將矽奈米線半徑縮小到 50nm，4-3(a)圖為採用過去塊材平均自由徑的溫度分佈圖，在 0.1 倍半徑以下和 0.7-0.9 倍長度出現一低於預設定溫邊界條件的區域，這是相當不合理的。而經由本文的修正改善了這樣不合理的現象，如圖 4-3(b)，因此本文的修正是相當合理且正確的修正，除了將模擬更逼近實驗結果外，其模擬結果也有其合理性。

圖 4-4 利用蘇聯一個有關半導體材料網站上取得的材料參數對溫

度的影響[38]，分析溫度對矽奈米線等效熱傳導係數的影響。由圖中發現矽奈米線的等效熱傳導係數隨著溫度的升高而上升：溫度小於30K時，等效熱傳導係數隨著溫度線性上升，而在約200到400K溫度下趨於穩定，此為受限塊材下的等效熱傳導係數隨溫度升高而上升的影響。相同溫度下，矽奈米線的等效熱傳導係數同樣受尺寸效應的影響隨尺寸的縮小而降低，然而降低的幅度相較於溫度的影響顯的較不明顯。並和 Majumdar [20]在2003年量測直徑為22nm、37nm、56nm及115nm的奈米線所得的結果比較。22nm直徑矽奈米線等效熱傳導係數的模擬結果和實驗值的表現上有一段蠻大的落差，推測尺寸在這麼小的情形下，聲子散射可能會有更進一步的量子效應產生，可能是本文理論的極限所在。

圖4-5是鍺奈米線在穩態定溫邊界條件下，比較30K、100K及300K溫度時，半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖。由圖中發現不管何種溫度情形，其等效熱傳導係數接隨著尺寸的縮小而降低，比較值得注意的是當溫度為30K時，其等效熱傳導係數和溫度的關係呈現接近線性的分佈，因為此時鍺的聲子平均自由徑約為 $8\mu m$ ，遠大於奈米線的幾何尺寸，由本文(2-44)式的修正，幾乎完全忽略聲子與聲子間的散射機會，因而其等效熱傳導係數與半徑呈線性關係。圖4-6則為鍺奈米線在穩態定溫邊界條件下，直徑分別為20nm、50nm及100nm時，溫度變化對其等效熱傳導係數的分佈圖。和矽奈米線的情形一樣，不管何種尺寸的鍺奈米線，其等效熱傳導係數皆隨著溫度的降低而下降，且在同樣溫度條件下，直徑越大的鍺奈米線，其等效熱傳導係數越高，此為徑向尺寸效應所造成的結果。另外，直徑為50nm及100nm的鍺奈米線在溫度為200K時有最大等效熱傳導係數，係因其巨觀下的等效熱傳導係數也在200K溫度下達到最大值，

而直徑為 20nm 的鎢奈米線，其等效熱傳導係數在溫度接近室溫時趨於穩定，這是因為尺寸效應的影響比較嚴重的緣故。

接著，利用本文的方法搭配非彈性散異理論模式處理界面問題，模擬在穩態室溫定溫邊界條件下，超晶格奈米線的熱傳情形。圖 4-7a 及 4-7b 分別為直徑 58nm 及 83nm 的  $\text{Si}/\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  超晶格奈米線等效熱傳導係數和週期厚度變化的分佈圖，其中由於文獻尚無法找到關於  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  半導體合金的相關參數，本文利用算數平均的概念估算。圖中並比較經由本文修正平均自由徑前後的模擬結果與 2003 年 Majumdar [39] 的量測實驗值，發現平均自由徑修正後的模擬結果與實驗值的誤差較修正前的降低了約 20%，顯示本文針對聲子平均自由徑的修正對於模擬超晶格奈米線等效熱傳導係數有不錯的結果。圖 4-8 則是  $\text{Si}/\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  超晶格奈米線等效熱傳導係數和溫度的分佈圖，同樣和 2003 年 Majumdar [39] 的量測實驗值比較。當溫度小於 30K 時，本文低估了其等效熱傳導係數，這是由於聲子波長和溫度成反比關係，30K 溫度下的聲子波長為 300K 溫度下的十倍以上（約為幾十個 nm），波動效應的忽略造成模擬結果的誤差。

圖 4-9a 及 4-9b 分別是直徑 20nm 及 50nm 的矽/鎢超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，搭配非彈性散異理論模式，比較採用不同聲子平均自由徑的情形下，週期厚度變化對其等效熱傳導係數的分佈圖，且和 Chen [28] 在 2004 年以輻射熱傳觀點的模擬結果作比較。首先，尚未使用本文的方法修正前，當週期厚度為 1000nm 時的等效熱傳導係數和 Chen 的結果一致，但隨著週期厚度的縮小，和 Chen 的誤差越來越大。經由本文修正聲子的平均自由徑之後，其等效熱傳導係數在所模擬週期厚度的區間中均較原先的情況低，且週期厚度為 1nm 時的等效熱傳導係數逼近 Chen 的模擬結果；然而週期厚度為

1000nm 時的等效熱傳導係數低於 Chen 的模擬結果，此為修正後的參數低於 Chen 使用的參數所造成的。

圖 4-10 為室溫穩態定溫邊界條件下，將本文的矽/鍺超晶格奈米線的直徑放大到 0.1mm 的情況下，用以模擬矽/鍺超晶格結構的熱傳行為，比較平均自由徑經由本文修正前後、Chen [28]在 2004 年對其等效熱傳導係數的模擬結果以及 Lee 等人[40]在 1997 年的量測結果。由圖中發現，經由本文的方式修正後的模擬結果幾乎與 Chen 的結果一致，且在 Lee 等人量測結果的估計之內，所以本方法是可以作為未來模擬矽/鍺超晶格結構熱傳行為之用。

圖 4-11 為室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對矽/鍺超晶格奈米線等效熱傳導係數的分佈圖，其直徑分別為 1mm（接近超晶格結構）、100nm、50nm、20nm 及 10nm。在相同直徑的情況下，其等效熱傳導係數隨週期厚度的縮小而降低，此為軸向尺寸效應的影響；而在相同週期厚度的情況下，其等效熱傳導係數隨著直徑的縮小而降低，此為徑向尺寸效應的影響。但當週期厚度小於 10nm 時，徑向尺寸效應對等效熱傳導係數的影響明顯小於軸向尺寸效應，原因可由接下來的溫度分佈及界面熱阻的影響來討論。

為了分析尺寸效應對超晶格奈米線熱傳的影響，圖 4-12 為固定矽/鍺超晶格奈米線的直徑為 100nm，比較週期厚度為(a)200nm、(b)100nm、(c)10nm 及(d)5nm 的溫度分佈圖。由圖 4-12(a)中發現當週期厚度大於直徑時，在材料交界面沒有出現溫度落差 (Temp. drop)，也就是不存在界面熱阻，溫度分佈類似圖 4-3(b)，呈現奈米線的分佈情形。而圖 4-12(b)為週期厚度等於直徑時的溫度分佈，在材料交界面開始出現溫度落差，且整體的溫度分佈情形也略為符合奈米線的情形。但週期厚度小於直徑的情形，如圖 4-12(c)及 4-12(d)，熱傳情形

主要受到界面熱阻的影響，且隨著週期厚度越小，界面熱阻的影響越來越重要。接著本文再將矽/鎢超晶格奈米線直徑縮小為 50nm，如圖 4-13，比較週期厚度為(a)100nm、(b)50nm、(c)10nm 及(d)5nm 的溫度分佈圖，情況和圖 4-12 的情形一致。另外，比較相同週期厚度，不同直徑的溫度分佈情形。圖 4-12(b)及圖 4-13(a)的超晶格奈米線，週期厚度皆為 100nm，直徑分別為 100nm 及 50nm，發現直徑為 50nm 的超晶格奈米線內部等溫線較為密集且集中在左側高溫處，但整體的平均熱傳卻較低，相同情況一樣出現在圖 4-12(c)及 4-13(c)和圖 4-12(d)及 4-13(d)。當週期厚度為 10nm，直徑分別為 100nm 及 50nm 的矽/鎢超晶格奈米線，其溫度分佈的情形皆出現明顯的界面熱阻影響，但進一步可以看出，週期厚度對直徑的比值越小，其內部的溫度分佈越呈現超晶格結構的分佈情形。

接著本文更進一步分析界面熱阻對矽/鎢超晶格奈米線熱傳行為的影響。圖 4-14 為矽/鎢超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，超晶格奈米線直徑和週期厚度變化對界面熱阻佔等效總熱阻的比重的分佈圖。在超晶格結構的情形下，發現界面熱阻對總熱阻的比值最大僅有約 0.006，這是相當不合理的現象。探究其原因是本文在超晶格奈米線圓周的邊界條件設定為定溫邊界條件，因此在圓周上幾乎沒有阻抗存在。為了去除因圓周定溫邊界條件所造成的影响，我們選取中心軸 ( $r=0$ ) 處的界面熱阻來分析，如圖 4-15。由圖中發現，在相同直徑下，界面熱阻隨著週期厚度的縮小，顯的越來越重要。另一方面，當直徑縮小至 20nm 或 10nm 時，若週期厚度大於超晶格奈米線的直徑，則界面熱阻趨近於 0，這和前面圖 4-12 及圖 4-13 的溫度分佈圖顯示的現象一致。由上可知，當超晶格奈米線的週期厚度大於直徑時，其主要熱傳行為以奈米線的單層二維圓柱熱傳模式為主，界面

理論在此範圍內可以忽略，本文稱之為「奈米線結構」的熱傳行為；當週期厚度小於直徑時，其熱傳行為由單層二維圓柱熱傳模式和多層二維圓柱熱傳模式共同影響，而影響程度的判定則由週期厚度對超晶格奈米線直徑的比值 ( $L_p/D$ ) 決定，當比值越小，則多層二維圓柱熱傳模式影響的程度越大，界面理論的準確性越重要，反之單層二維圓柱熱傳模式的影響程度較大。

圖 4-16—4-19 分別為 25nm、50nm、75nm 及 100nm 週期厚度的矽/鎢超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，改變矽材料的含量，探討矽及鎢兩材料所佔比率對其等效熱傳導係數的分佈圖，橫軸  $x$  代表矽材料體積和超晶格奈米線總體積的比值， $x$  值越大，矽材料的體積越大，當  $x$  為 0.5 時，表示矽、鎢兩材料的體積相等。圖 4-16 中發現相同材料比率下，徑向尺寸效應造成等效熱傳導係數隨著直徑的縮小而降低。由前文可知，當直徑遠大於週期厚度時（如直徑為 100nm、200nm 或 1000nm），超晶格奈米線內部呈現超晶格結構的熱傳現象，由圖 4-16 發現此時超晶格奈米線的等效熱傳導係數隨著矽含量的增加而增加。另外，直徑縮小至 50nm 的超晶格奈米線，其等效熱傳導係數約在矽、鎢體積相同時有最大值 ( $x=0.5$ )，當  $x<0.5$  時超晶格結構效應較強，使得其等效熱傳導係數隨著矽含量的增加而上升；而當  $x>0.5$  時的熱傳行為受奈米線結構的影響，在相同溫度梯度時，矽含量的增加反而使得等效熱傳導係數降低。而直徑進一步再縮小至 20nm 時，奈米線結構的影響較超晶格結構來的嚴重，造成等效熱傳導係數的極大值提早出現。

超晶格奈米線週期厚度放大為 50nm、75nm 以及 100nm 時的情況和圖 4-16 相似，差異在於當直徑接近或小於週期厚度時，材料比重的影響甚至會大於徑向尺寸效應使得直徑較小的超晶格奈米線等

效熱傳導係數會大於直徑較大的。另外，也可從溫度分佈圖中發現此一現象。圖 4-20 是週期厚度 100nm 的矽/鎗超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖。圖 4-20b、4-20d 及 4-20f 分別為  $x=0.2$ 、 $0.5$  及  $0.8$  直徑 20nm 的矽/鎗超晶格奈米線溫度分佈圖，等溫線皆集中在左側高溫處，相同直徑下，體積越大者，其厚度越大，同樣的等效熱傳導係數也就越小，即鎗材料對等效熱傳導係數沒有任何貢獻。而直徑為 100nm 的矽/鎗超晶格奈米線溫度分佈圖，如圖 4-20a ( $x=0.2$ )、圖 4-20c ( $x=0.5$ ) 及圖 4-20f ( $x=0.8$ ) 所示，圖 4-20a 的溫度分佈情形主要受到超晶格結構的影響，故此時的等效熱傳導係數隨著矽含量的增加而上升，之後隨著矽含量增加至奈米線效應的出現，其溫度分佈圖將保持為圖 4-20f 的情形，故其等效熱傳導係數反而隨著矽含量的增加而降低。而圖 4-21 是週期厚度 50nm 的矽/鎗超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖，上述之現象在圖 4-21a、圖 4-21c 及圖 4-21e 中也有出現。

圖 4-22 為砷化鎵/砷化鋁超晶格結構在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖，比較本文修正聲子平均自由徑前後的模擬結果與 Capinski 等人[41]於 1996 年的實驗量測結果。如圖，本文修正後的模擬結果反而低估的其等效熱傳導係數，可見界面散射效應不是超晶格結構等效熱傳導係數下降的主因，而是尺寸效應。圖 4-23 為室溫穩態邊界條件下，直徑及週期厚度變化對砷化鎵/砷化鋁超晶格奈米線等效熱傳導係數的分佈圖。如同矽/鎗超晶格奈米線情形，其等效熱傳導係數同樣受到軸向及徑向尺寸效應的影響，隨著幾何尺寸的縮小而降低。

圖 4-24 為鉻化碲/鎢化碲超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件

下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖，比較本文修正聲子平均自由徑前後的模擬結果與 Touzelbaev 等人[42]於 2001 年的實驗量測結果。由於鈮化碲和銻化碲的聲子平均自由徑大約只有 0.5nm 左右，因此本文對於這兩種材料聲子平均自由徑的修正幅度相當小，故修正前後對於等效熱傳導係數模擬結果的差異性，沒有前述兩種材料（矽/鍺、砷化鎵/砷化鋁）大，並且均在實驗量測結果的範疇內。圖 4-25 為室溫穩態邊界條件下，直徑及週期厚度變化對鈮化碲/銻化碲超晶格奈米線等效熱傳導係數的分佈圖。同樣地，其等效熱傳導係數受軸向及徑向的尺寸效應影響，隨著尺寸的縮小而降低，但由於其聲子平均自由徑僅有約 0.5nm，因此尺寸效應對鈮化碲/銻化碲超晶格奈米線的影響程度較小。

接著，本文比較矽/鍺、砷化鎵/砷化鋁及鈮化碲/銻化碲三種超晶格結構的界面熱阻隨週期厚度變化的關係圖，如圖 4-26。發現三種材料的界面熱阻和週期厚度無關，僅和材料性質有關，且鈮化碲/銻化碲間的界面阻抗最大，矽/鍺次之，砷化鎵/砷化鋁最小。另外，圖 4-27 為矽/鍺、砷化鎵/砷化鋁及鈮化碲/銻化碲三種超晶格奈米線（直徑 20nm）界面熱阻隨週期厚度變化的關係圖。在週期厚度小於 10nm 時的情況和圖 4-26 一樣，鈮化碲/銻化碲間的界面阻抗最大。但是當週期厚度大於 10 之後，界面熱阻隨著週期厚度的增加而急速下降，其中下降幅度最大的是矽/鍺超晶格奈米線。

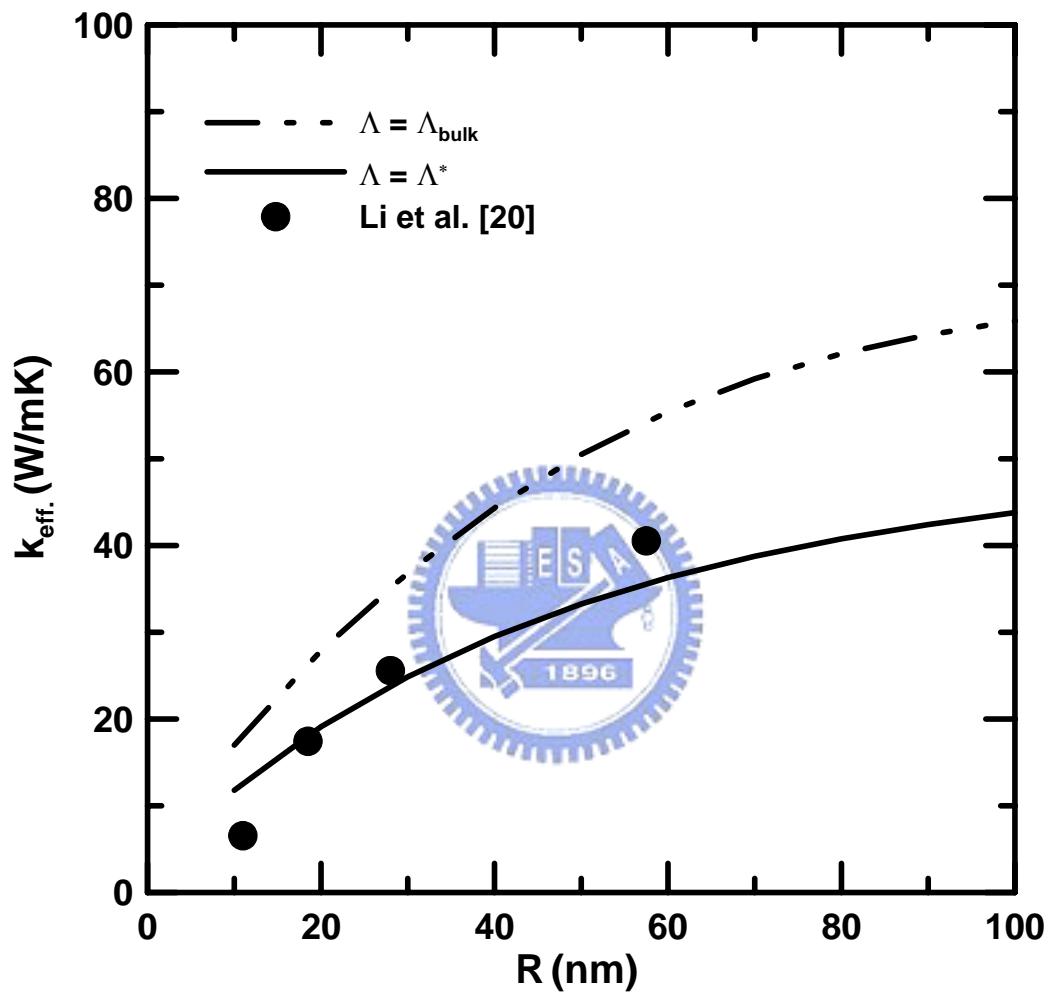
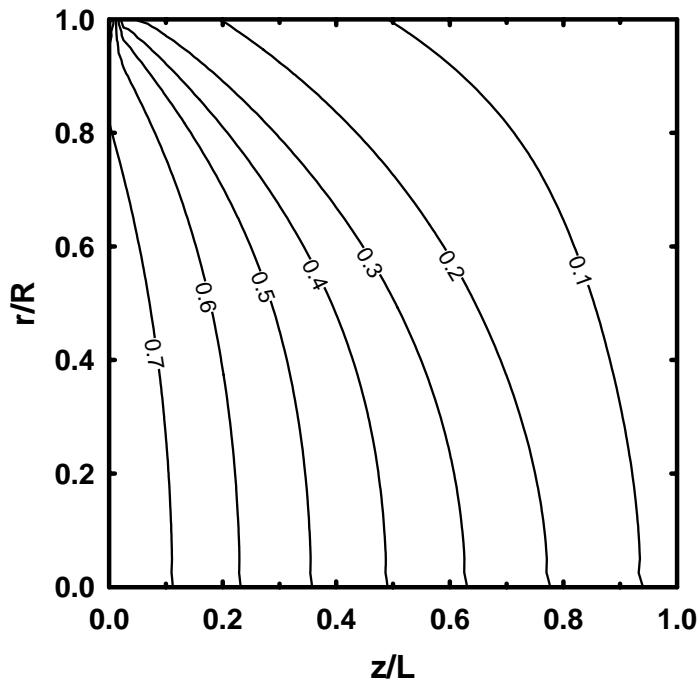
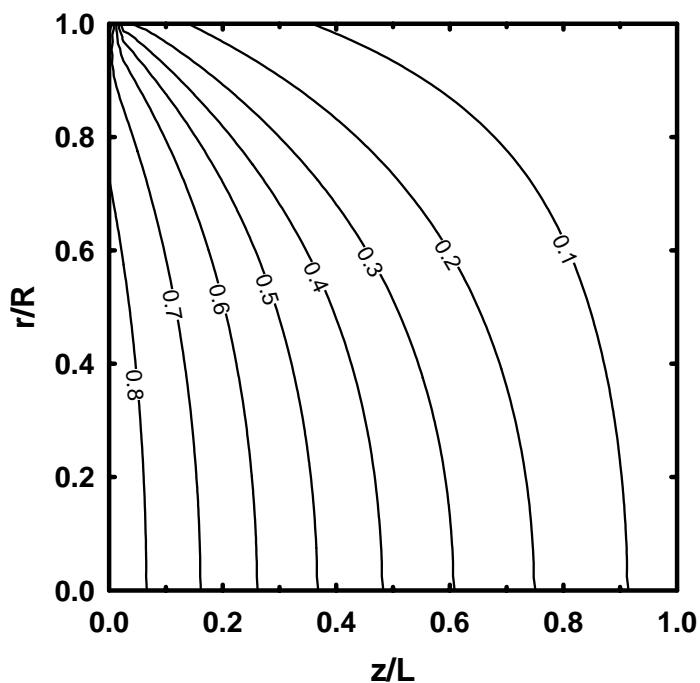


圖 4-1 長度 100nm 的 Si 奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖

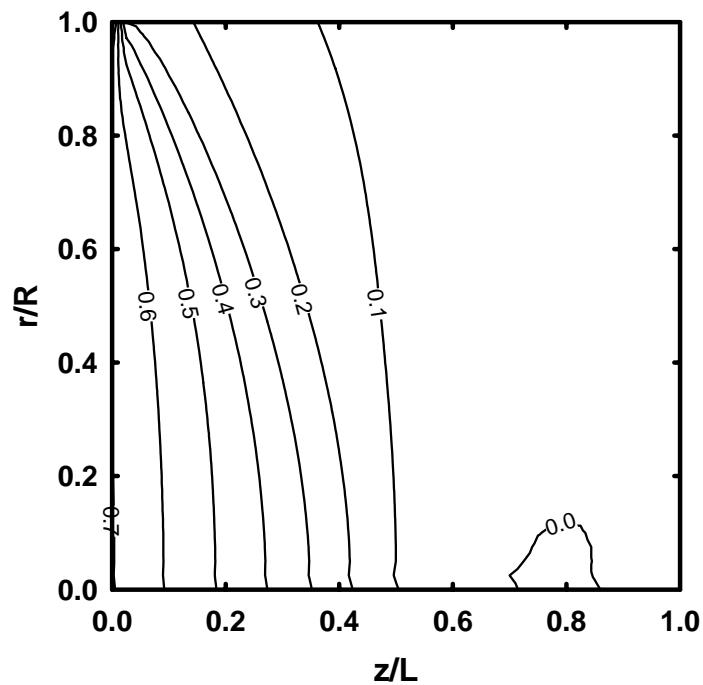


(a)

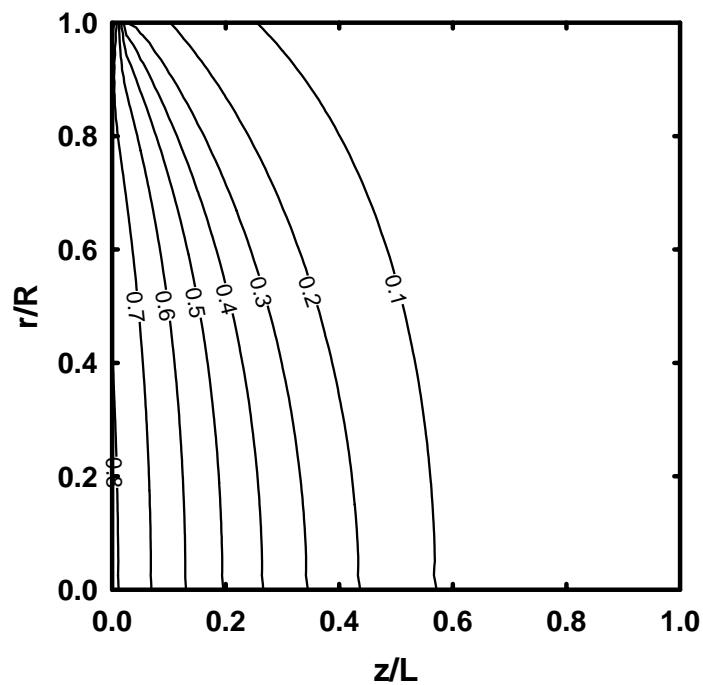


(b)

圖 4-2 長度及半徑皆為 100nm 的 Si 奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，奈米線內部的溫度分佈圖：(a)MFP 修正前、(b)MFP 修正後



(a)



(b)

圖 4-3 長度 100nm、半徑 50nm 的 Si 奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，奈米線內部的溫度分佈圖：(a)MFP 修正前、(b)MFP 修正後

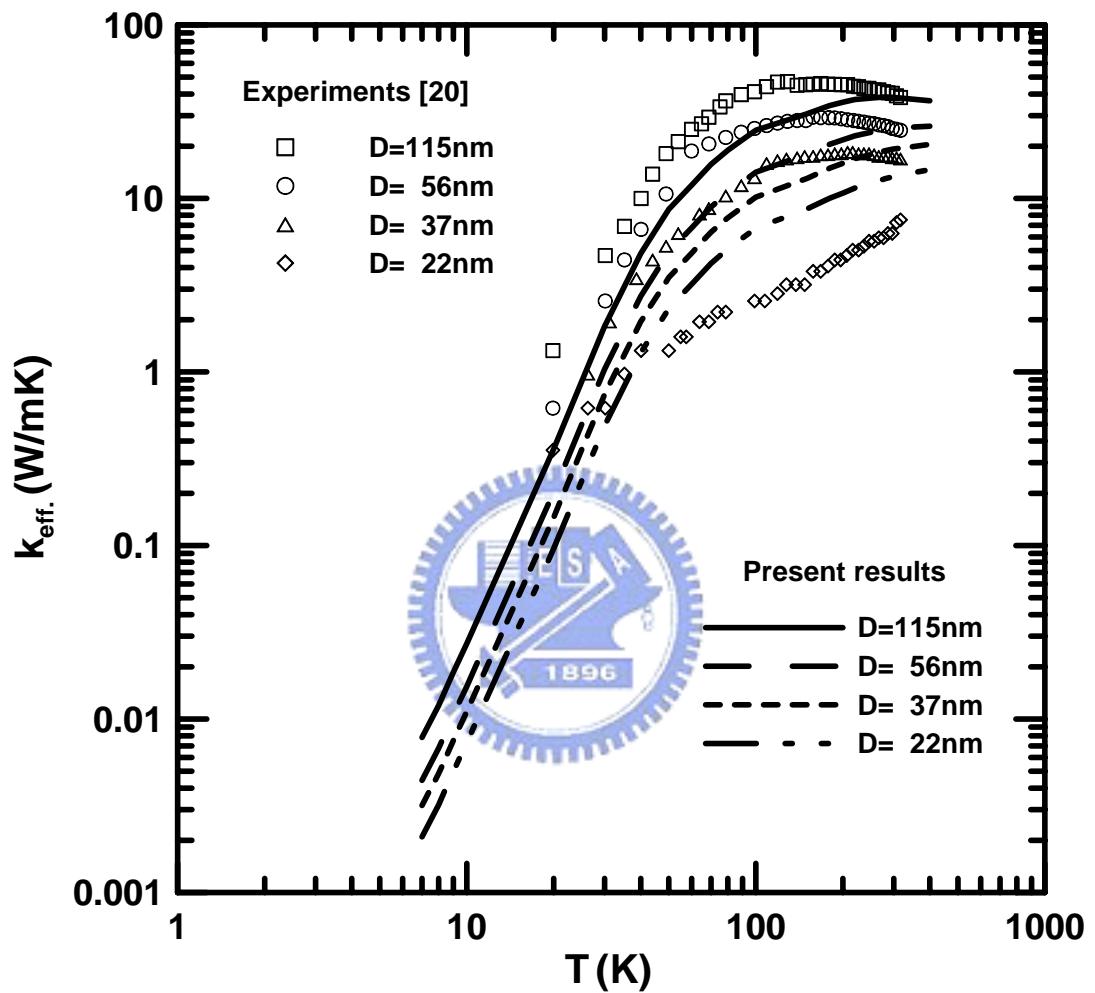


圖 4-4 長度 100nm 的 Si 奈米線，在穩態定溫邊界條件下，直徑和溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

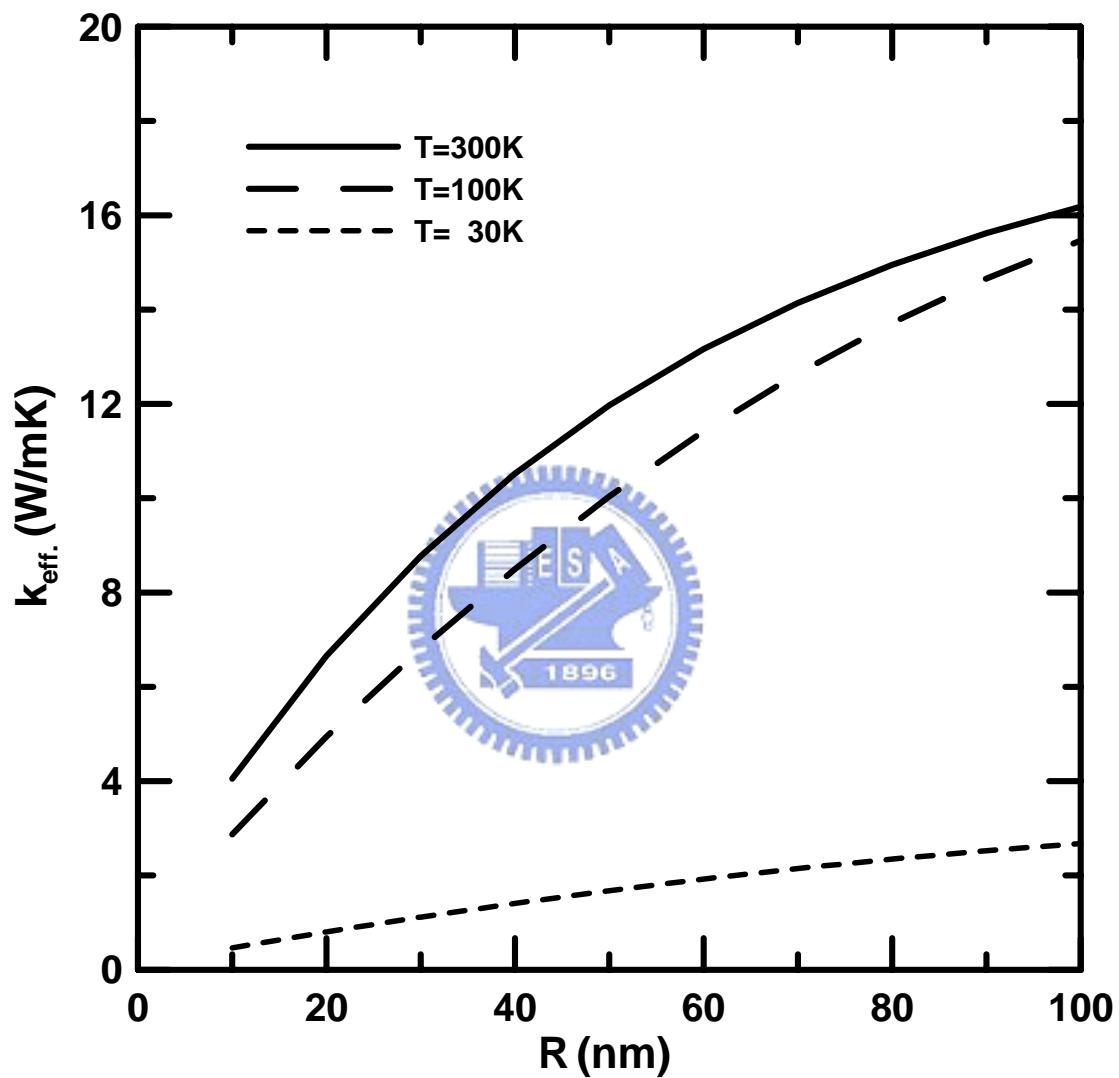


圖 4-5 長度 100nm 的 Ge 奈米線，在穩態定溫邊界條件下，比較溫度為 300K、100K 及 30K 時，半徑變化對等效熱傳導係數的分佈圖

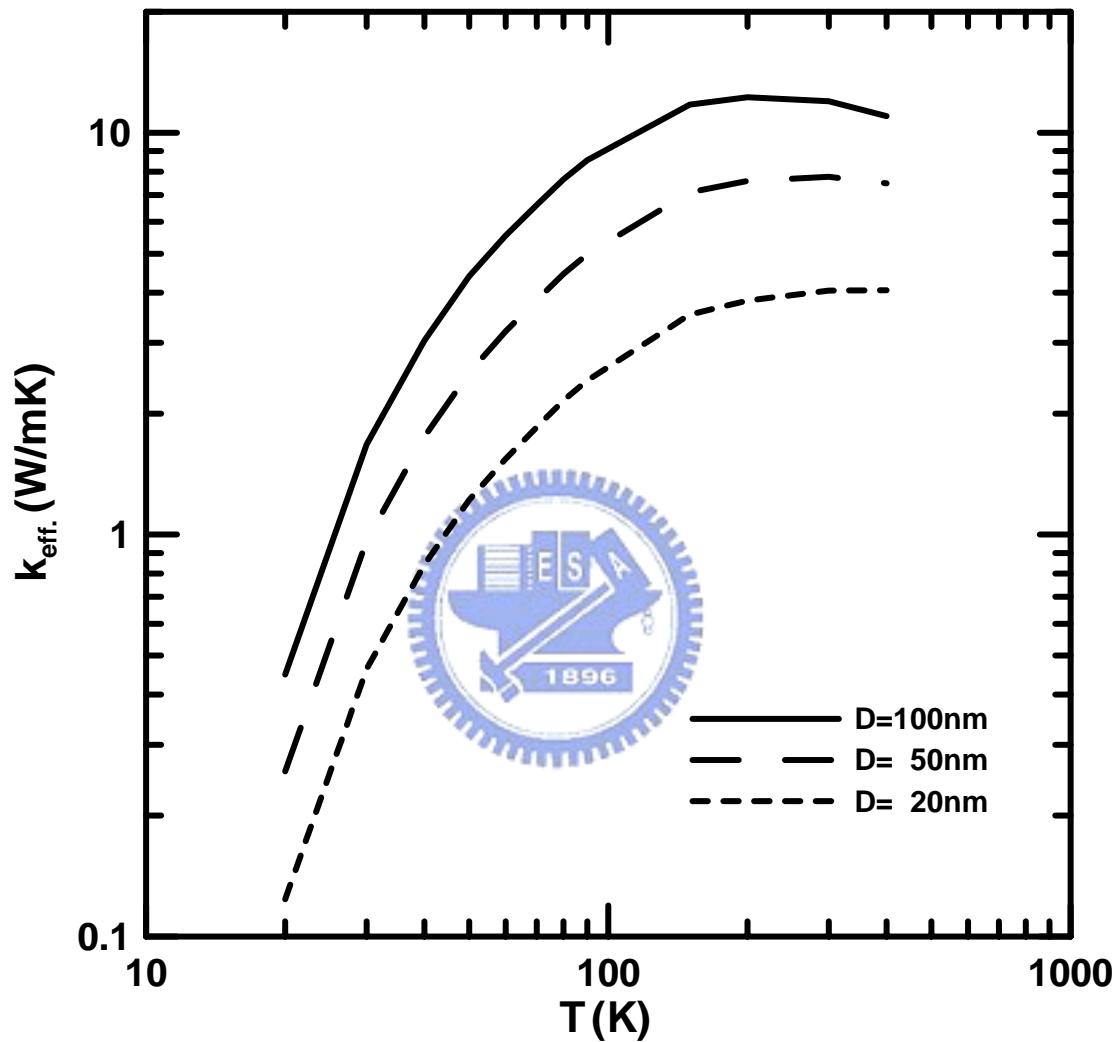
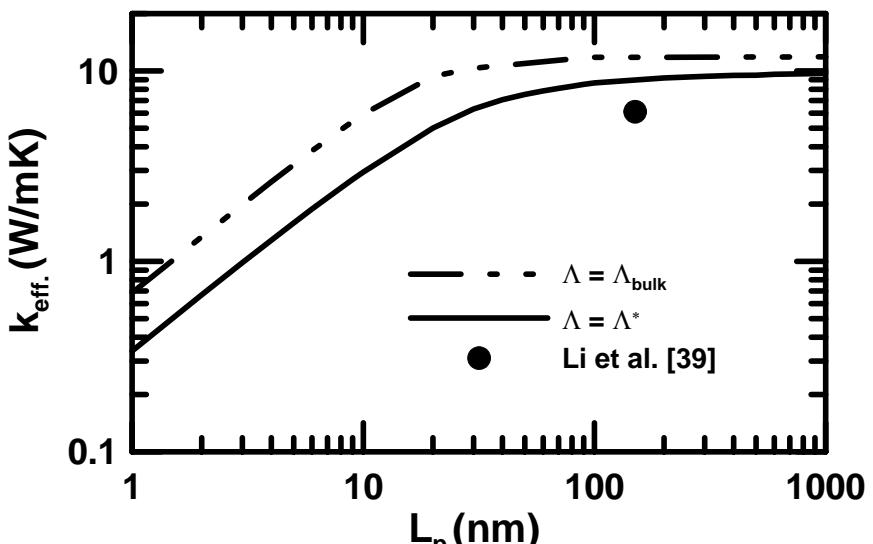
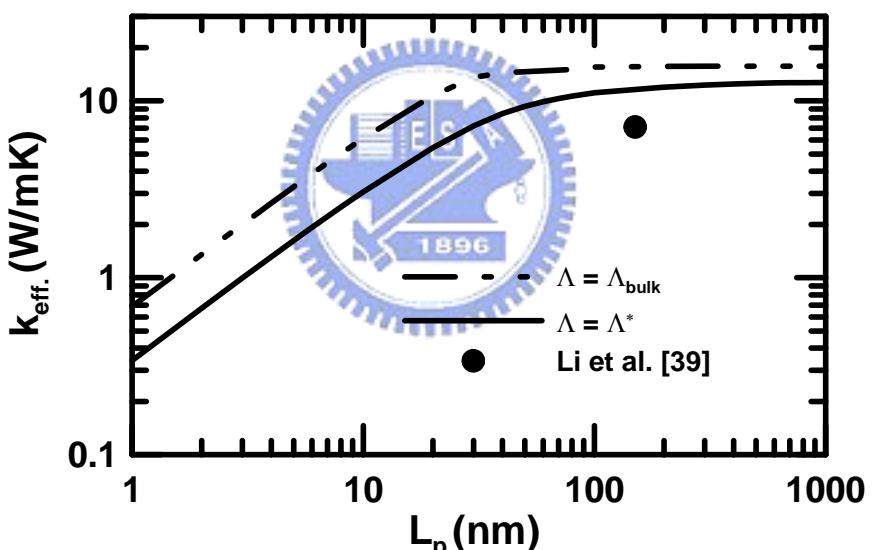


圖 4-6 長度 100nm 的 Ge 奈米線，在穩態定溫邊界條件下，比較直徑為 100nm、50nm 及 20nm 時，溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖



(a)



(b)

圖 4-7 Si/Si<sub>0.9</sub>Ge<sub>0.1</sub> 超晶格奈米線直徑為(a) 58nm及(b)83nm，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

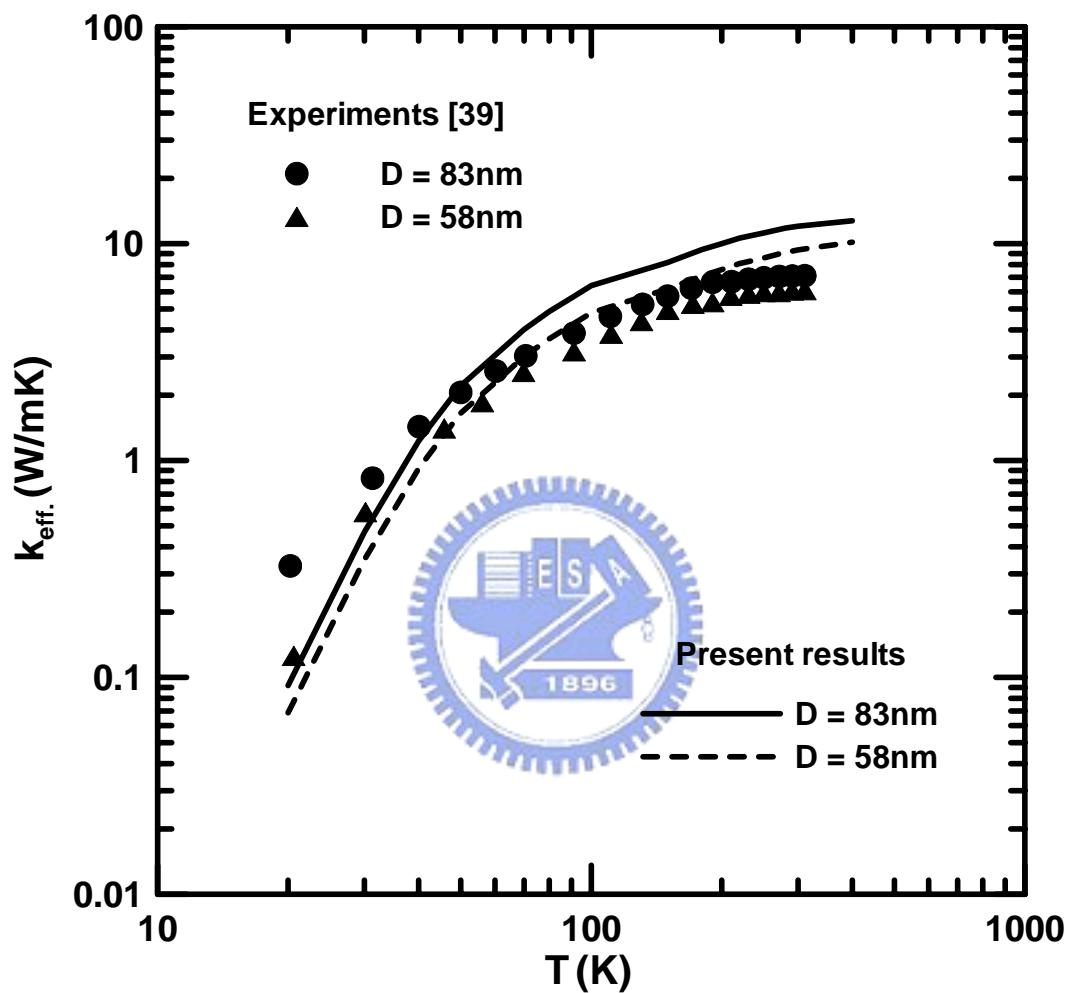
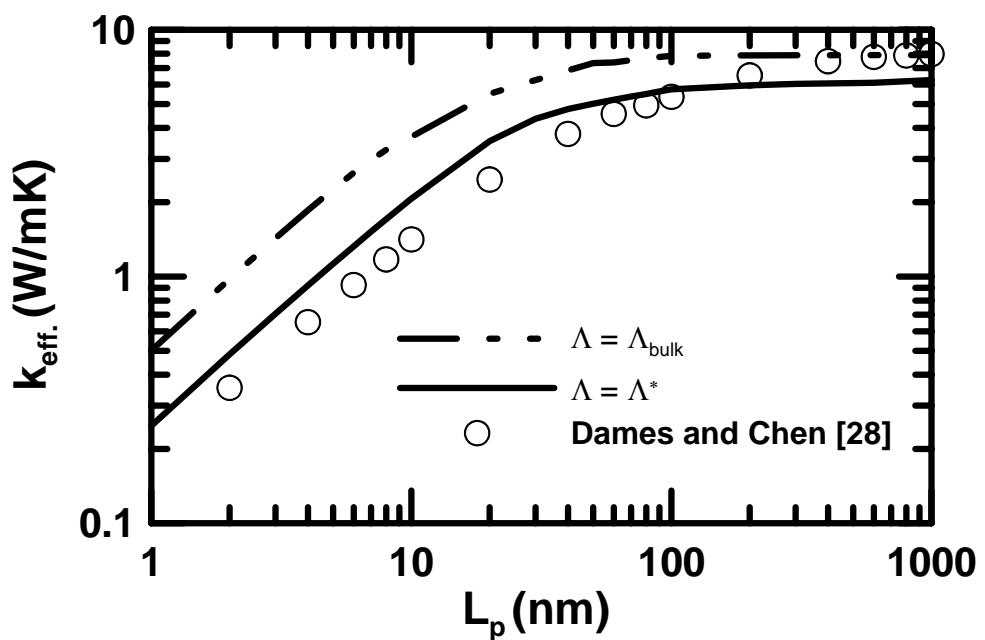
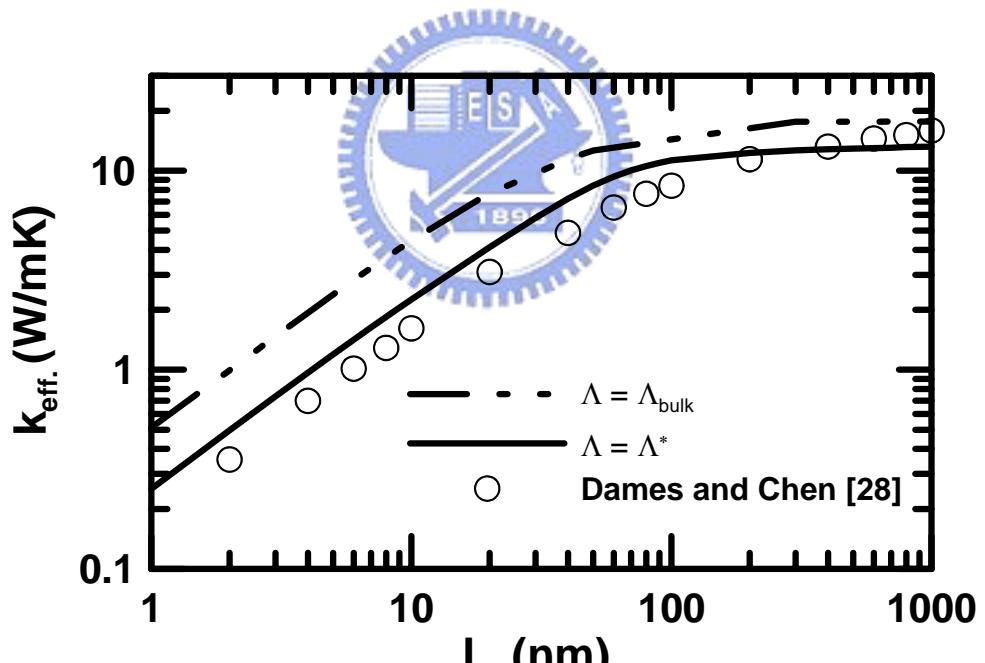


圖 4-8 週期厚度 150nm 的  $\text{Si/Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  超晶格奈米線，在穩態定溫邊界條件下，直徑和溫度變化對等效熱傳導係數的分佈圖



(a)



(b)

圖 4-9 Si/Ge 超晶格奈米線直徑為(a)20nm 及(b)50nm, 在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

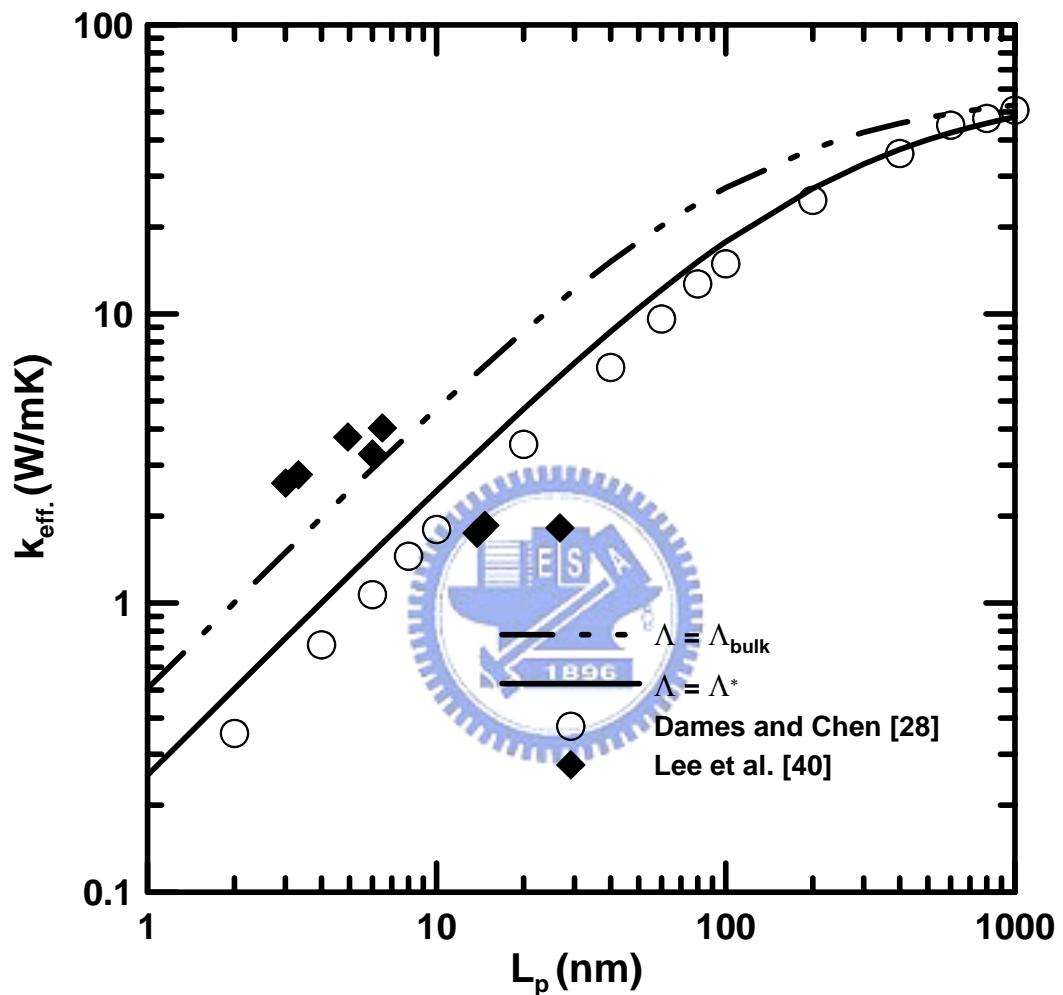


圖 4-10 Si/Ge 超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

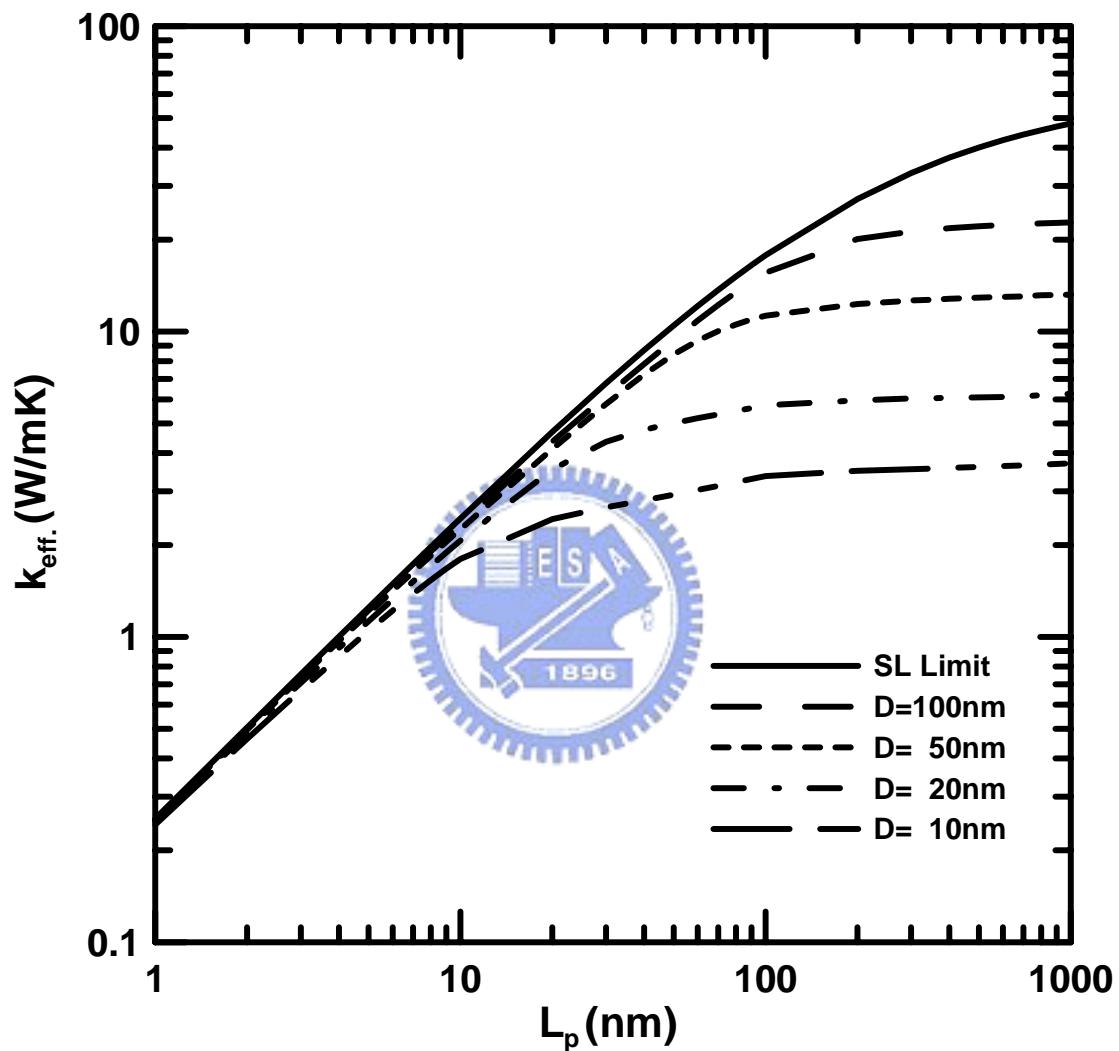


圖 4-11 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

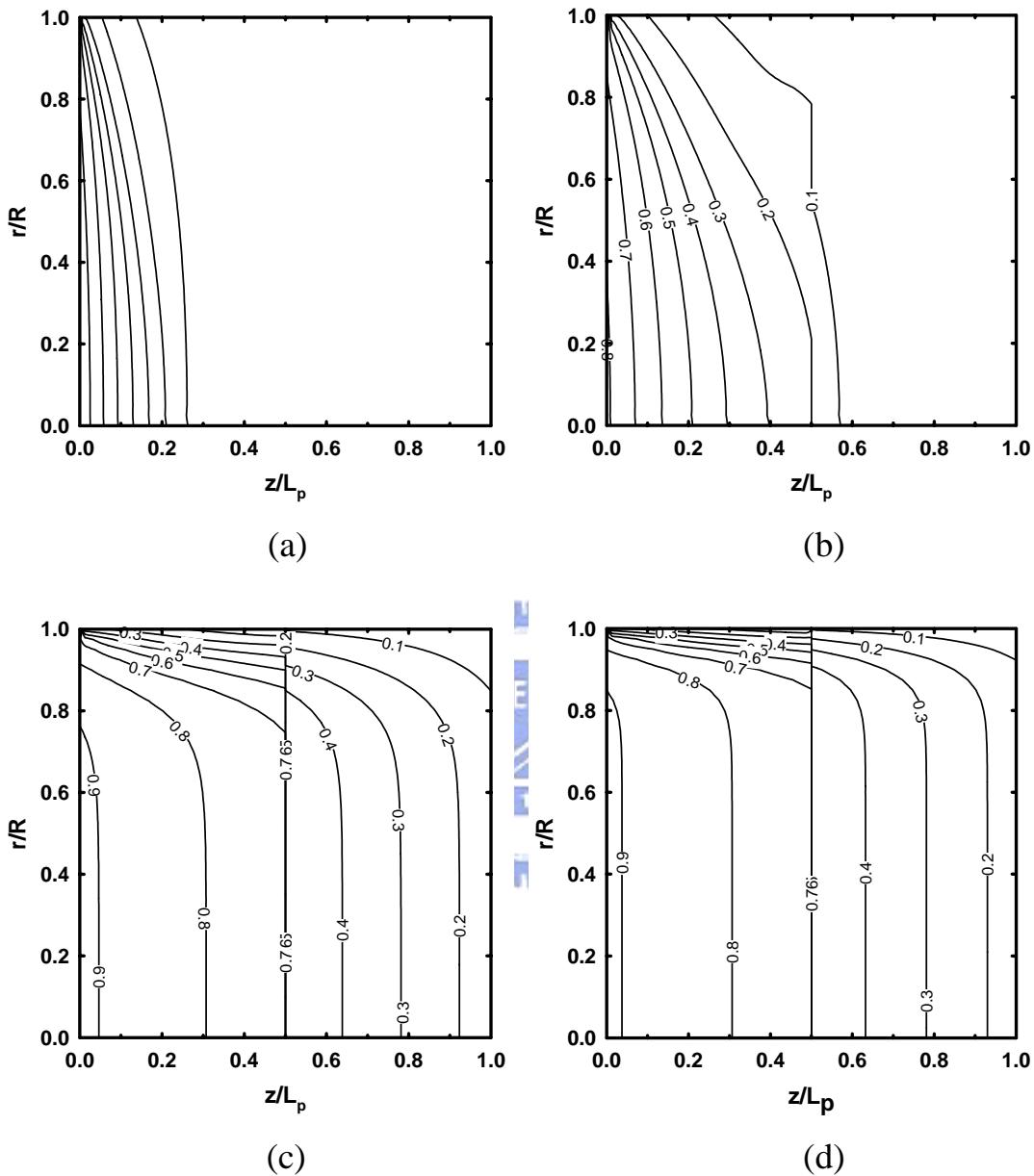


圖 4-12 直徑 100nm 的 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為(a)200nm、(b)100nm、(c)10nm 及(d)5nm 的溫度分佈圖

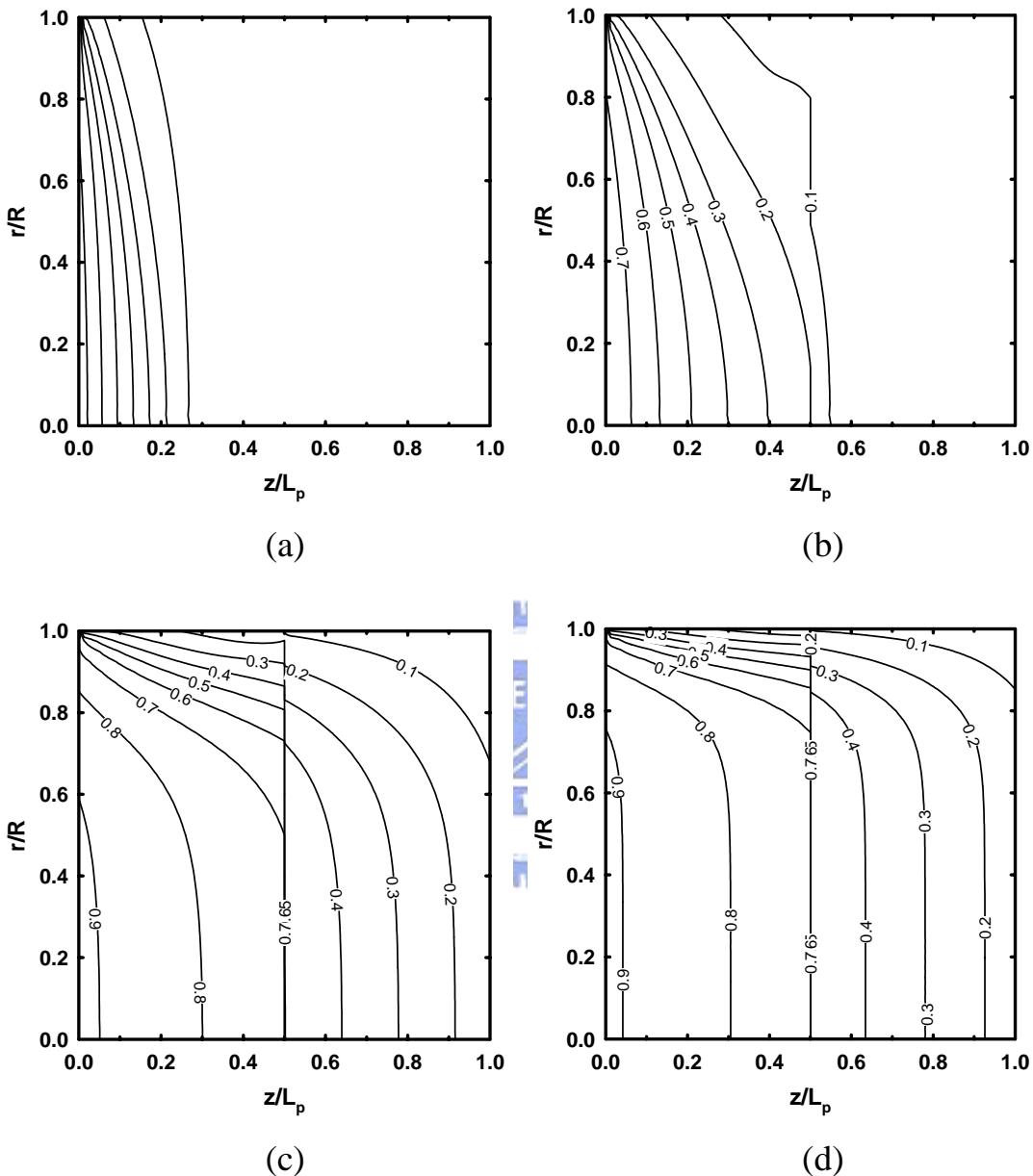


圖 4-13 直徑 50nm 的 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度分別為(a)100nm、(b)50nm、(c)10nm 及(d)5nm 的溫度分佈圖

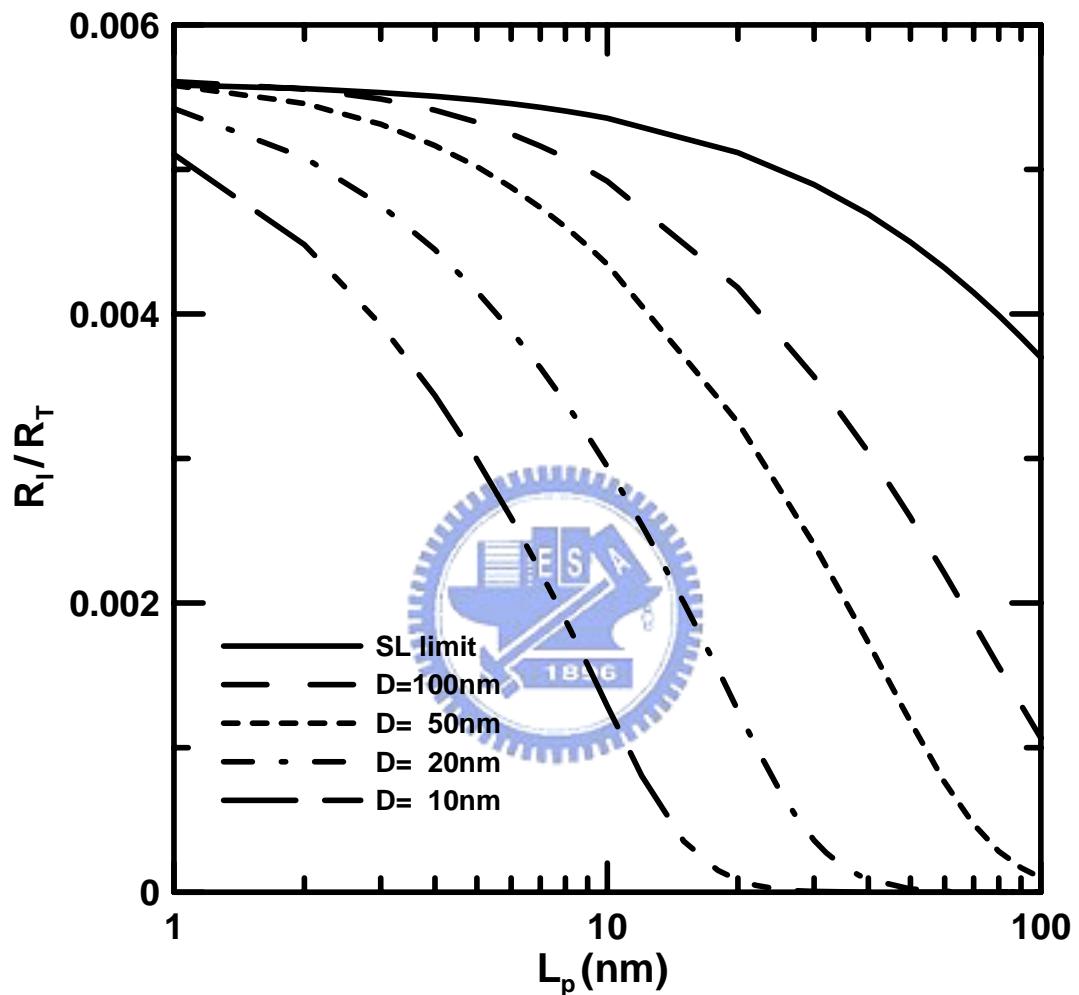


圖 4-14 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對界面熱阻佔等效總熱阻比重的分佈圖

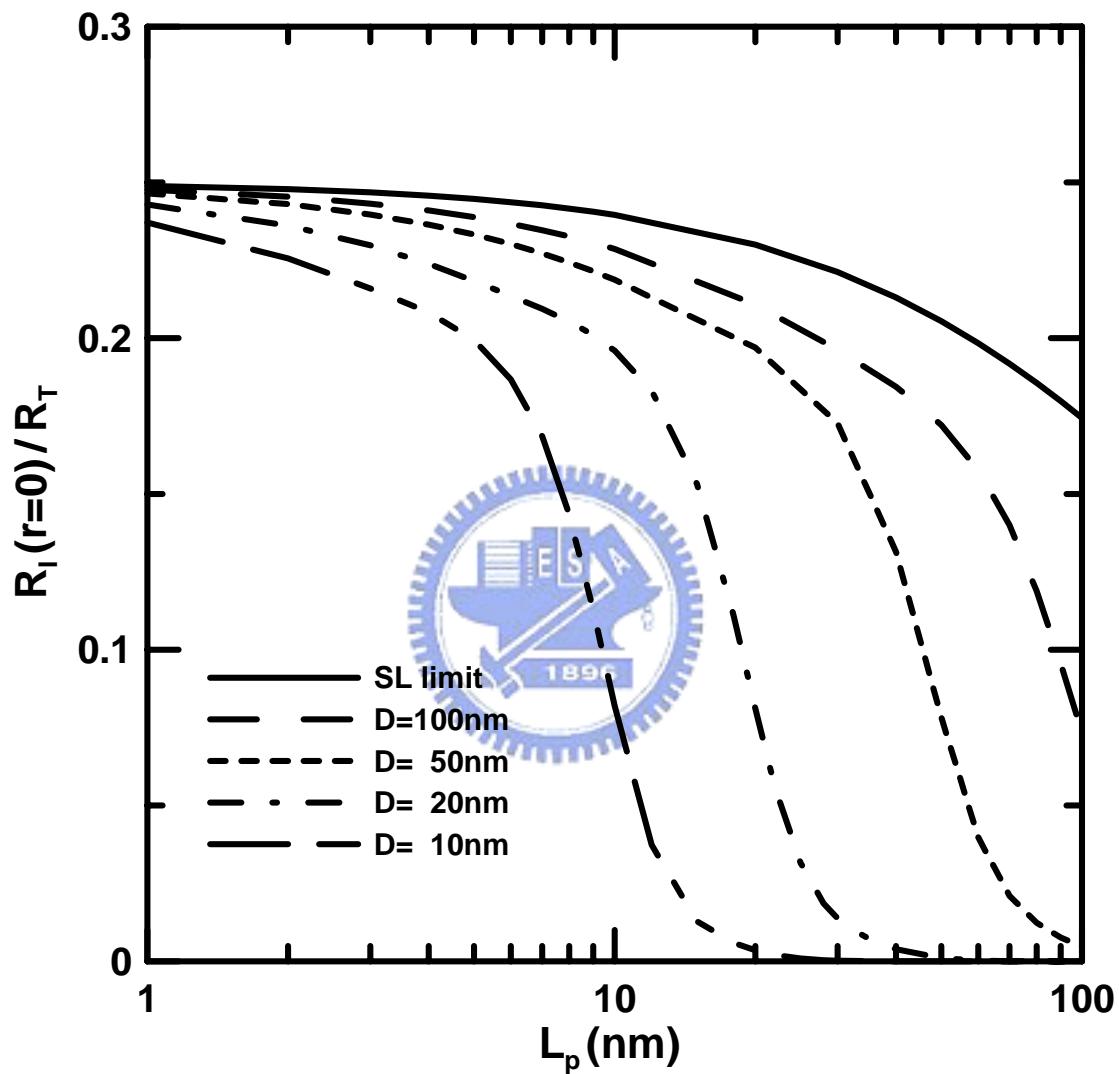


圖 4-15 Si/Ge 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對中心軸界面熱阻佔等效總熱阻比重的分佈圖

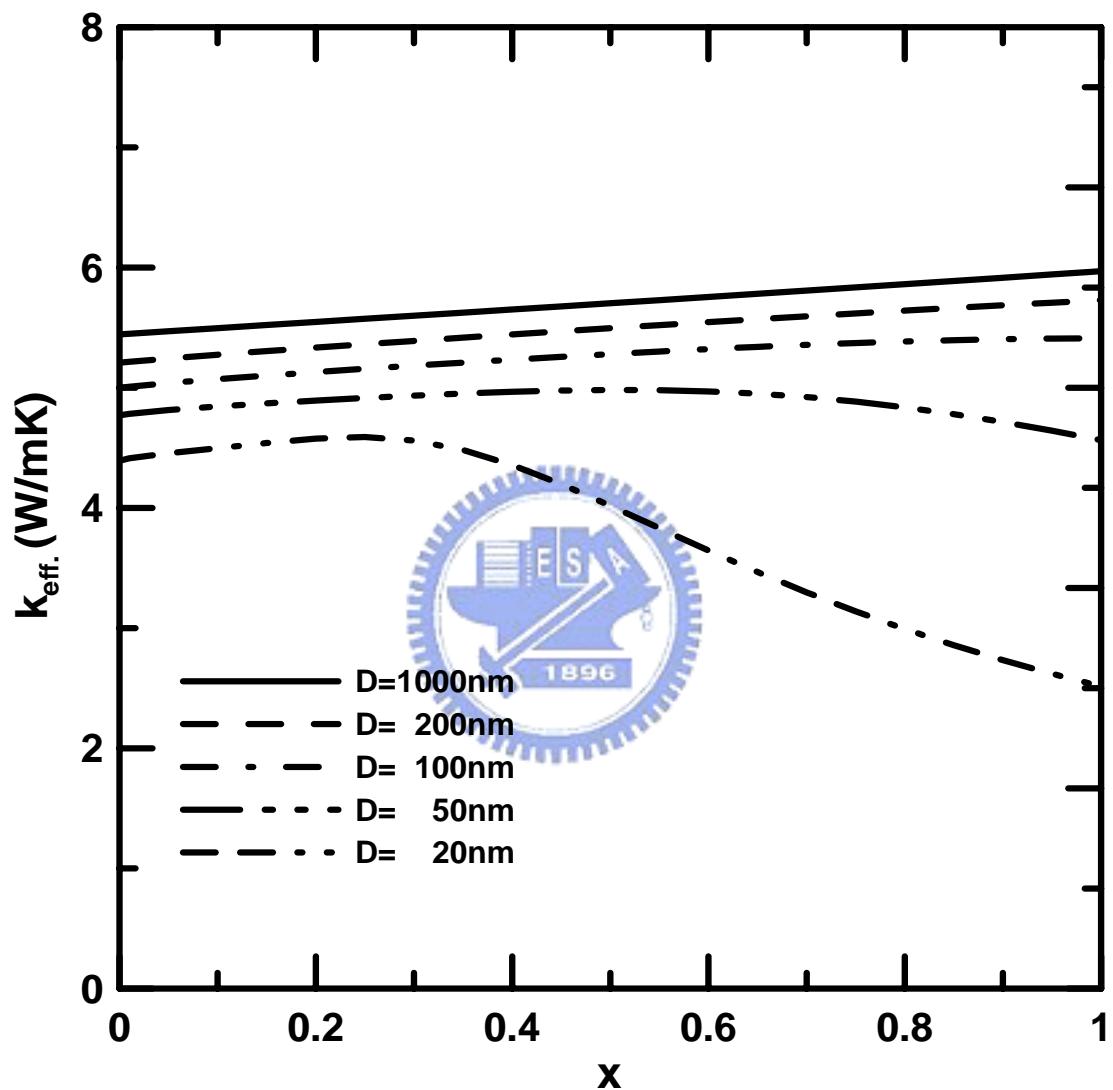


圖 4-16 週期厚度 25nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重對等效熱傳導係數的分佈圖

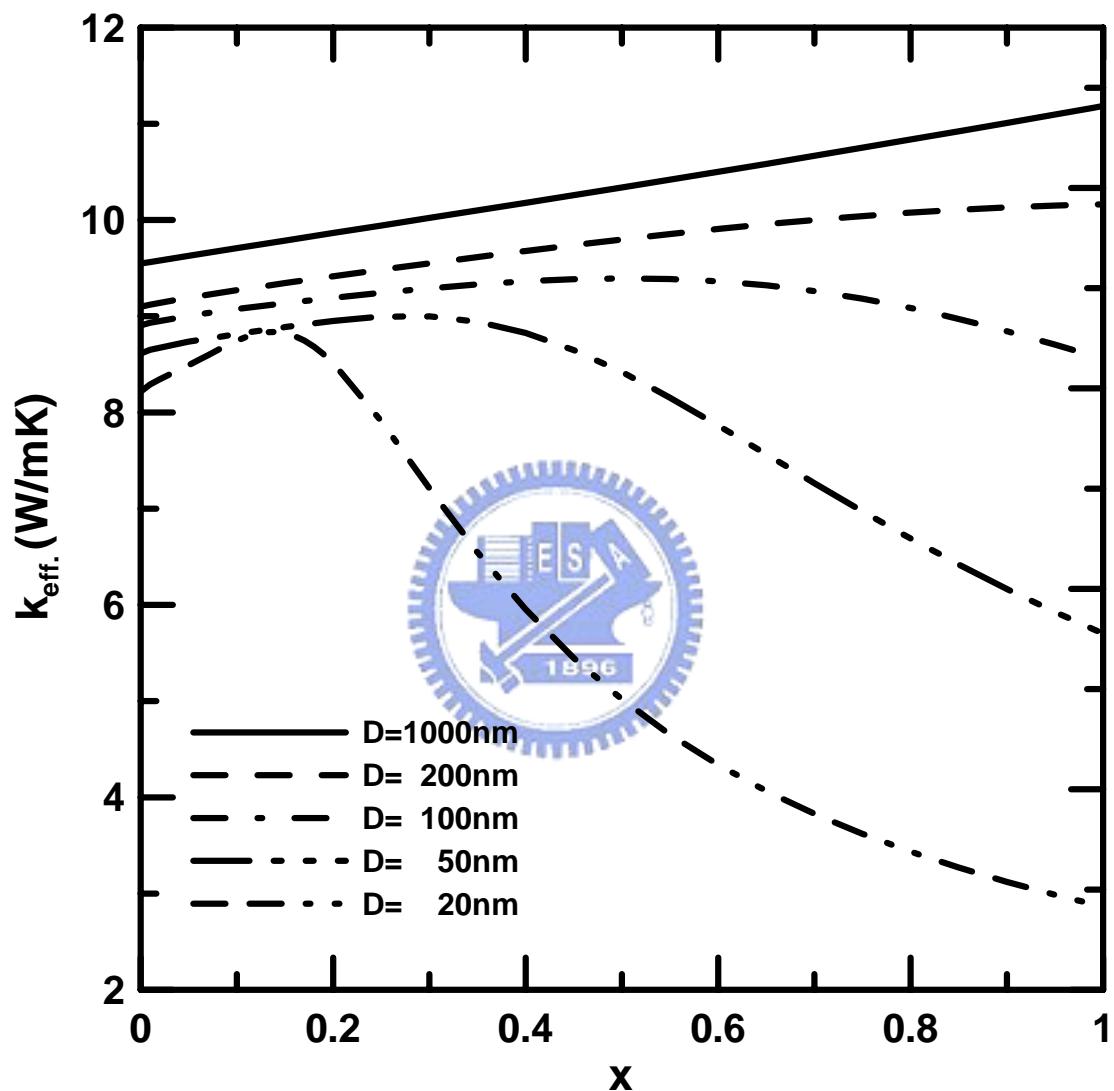


圖 4-17 週期厚度 50nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重對等效熱傳導係數的分佈圖

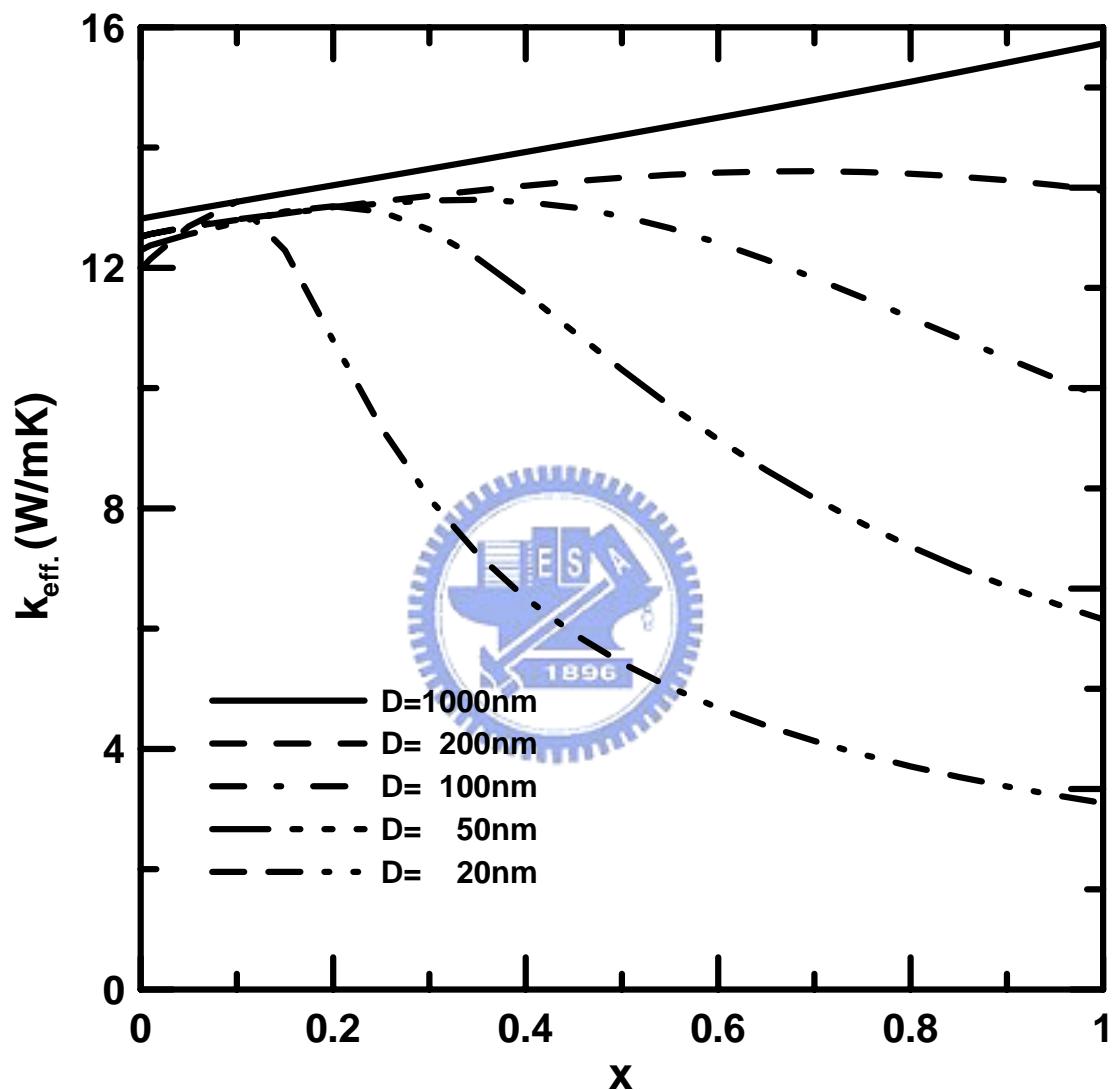


圖 4-18 週期厚度 75nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重變化對等效熱傳導係數的分佈圖

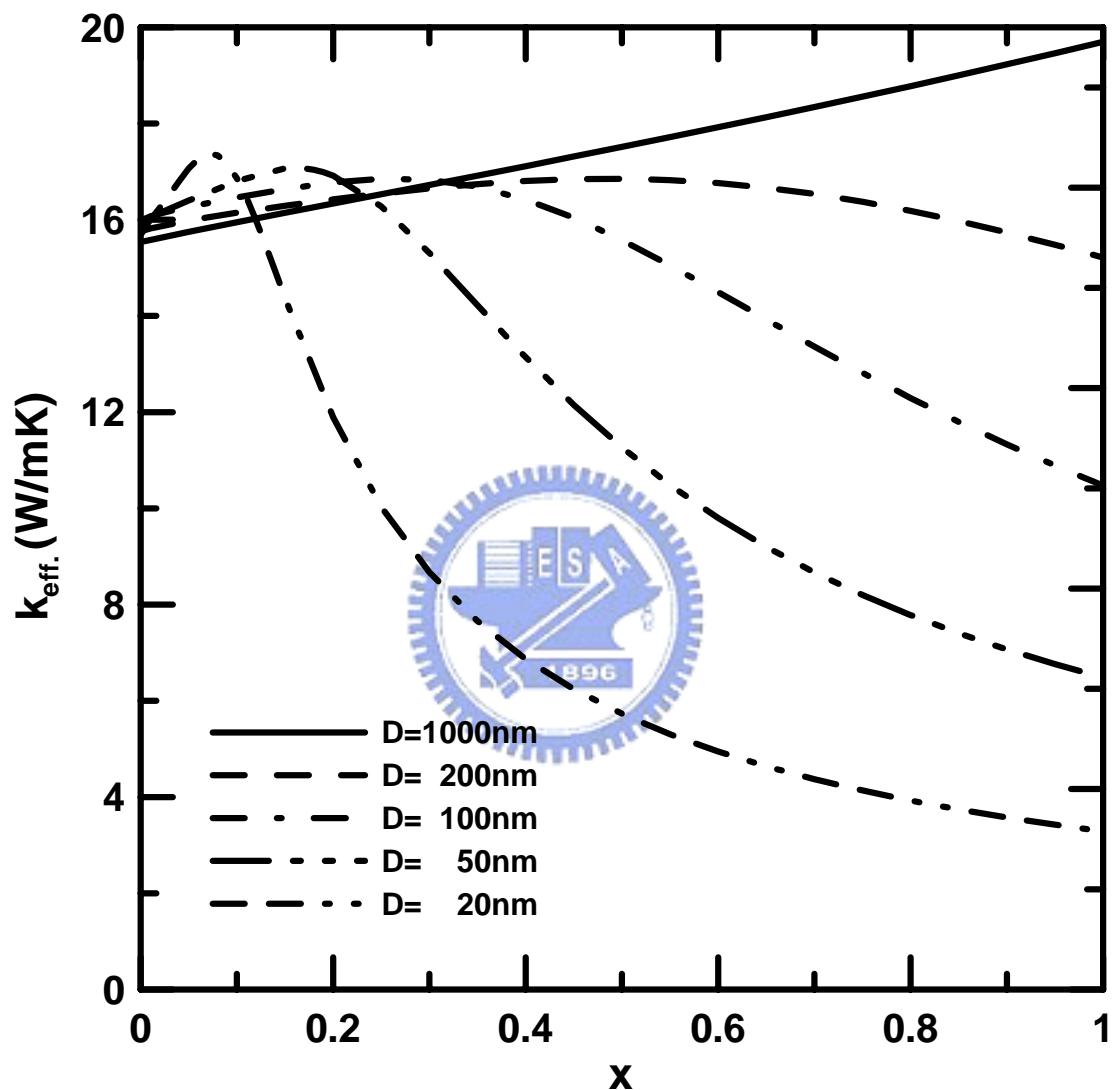
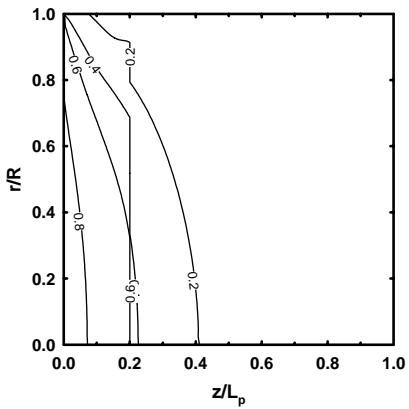
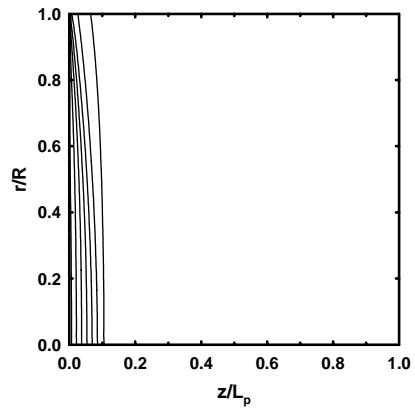


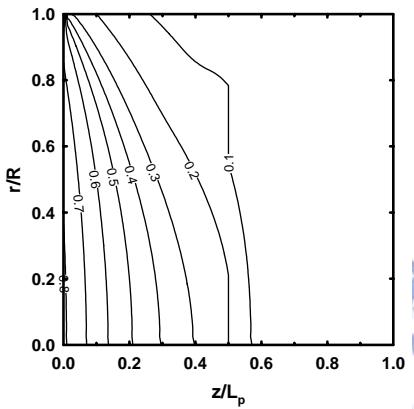
圖 4-19 週期厚度 100nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和矽含量佔總材料比重變化對等效熱傳導係數的分佈圖



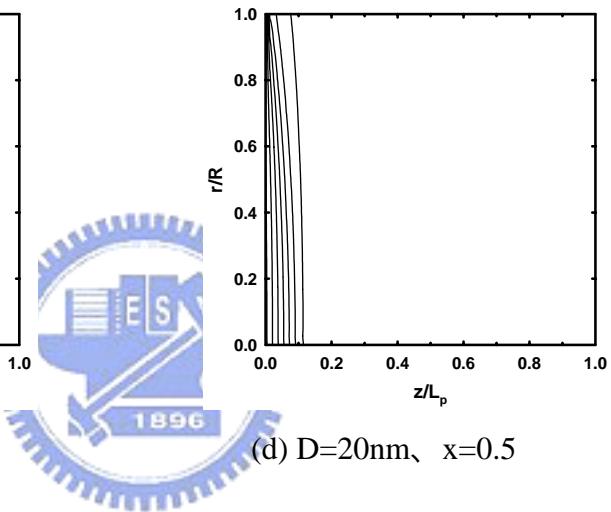
(a)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.2$



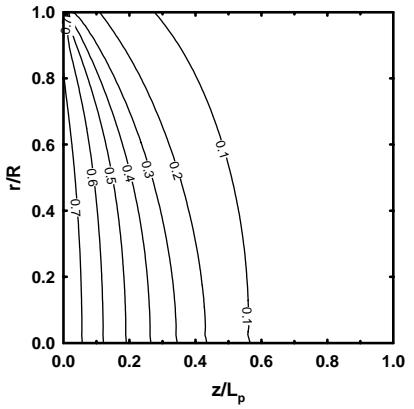
(b)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.2$



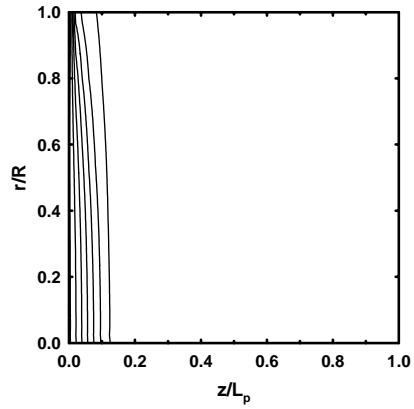
(c)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.5$



(d)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.5$

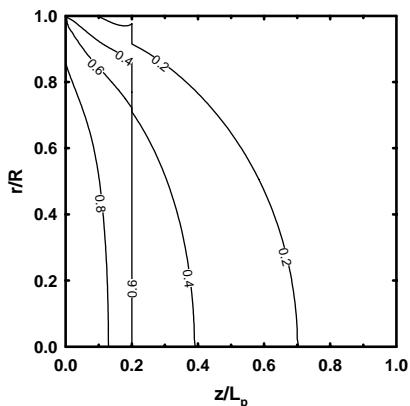


(e)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.8$

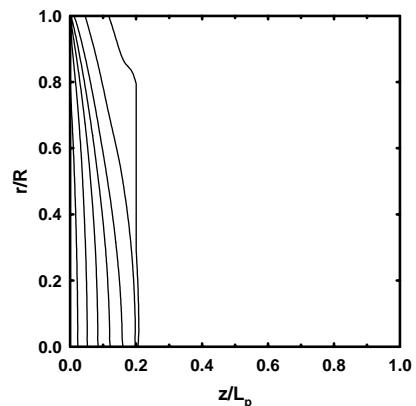


(f)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.8$

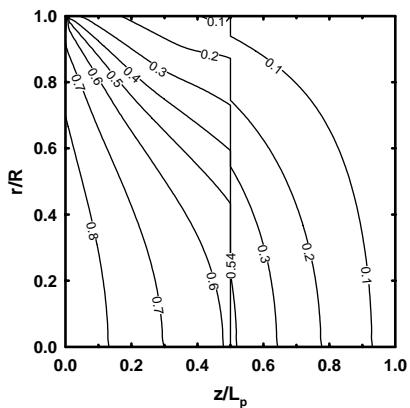
圖 4-20 週期厚度 100nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖



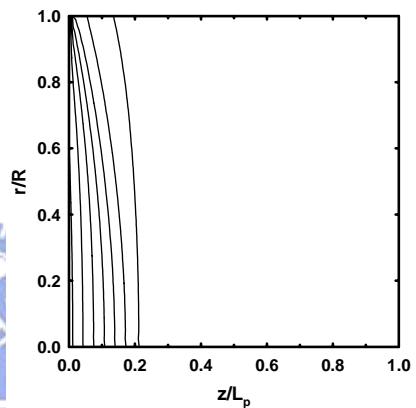
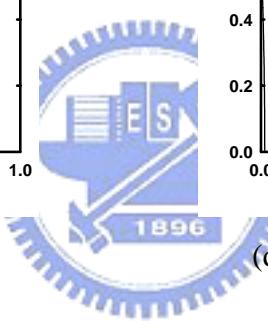
(a)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.2$



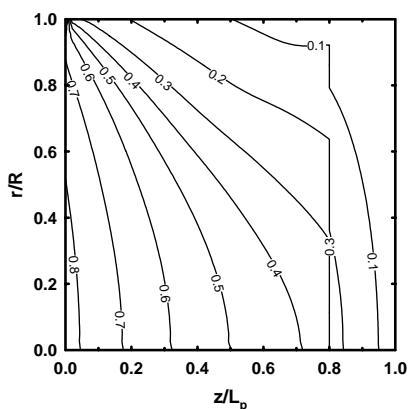
(b)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.2$



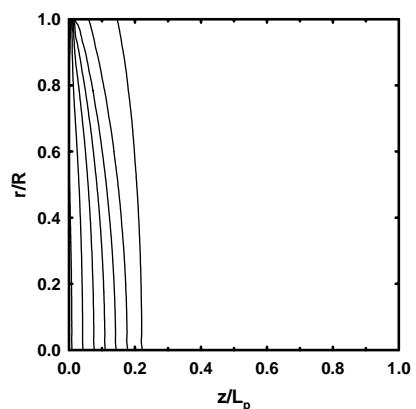
(c)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.5$



(d)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.5$



(a)  $D=100\text{nm}$ 、 $x=0.8$



(b)  $D=20\text{nm}$ 、 $x=0.8$

圖 4-21 週期厚度 50nm 的  $\text{Si}_x/\text{Ge}_{1-x}$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，不同幾何尺寸、不同組成比率的溫度分佈圖

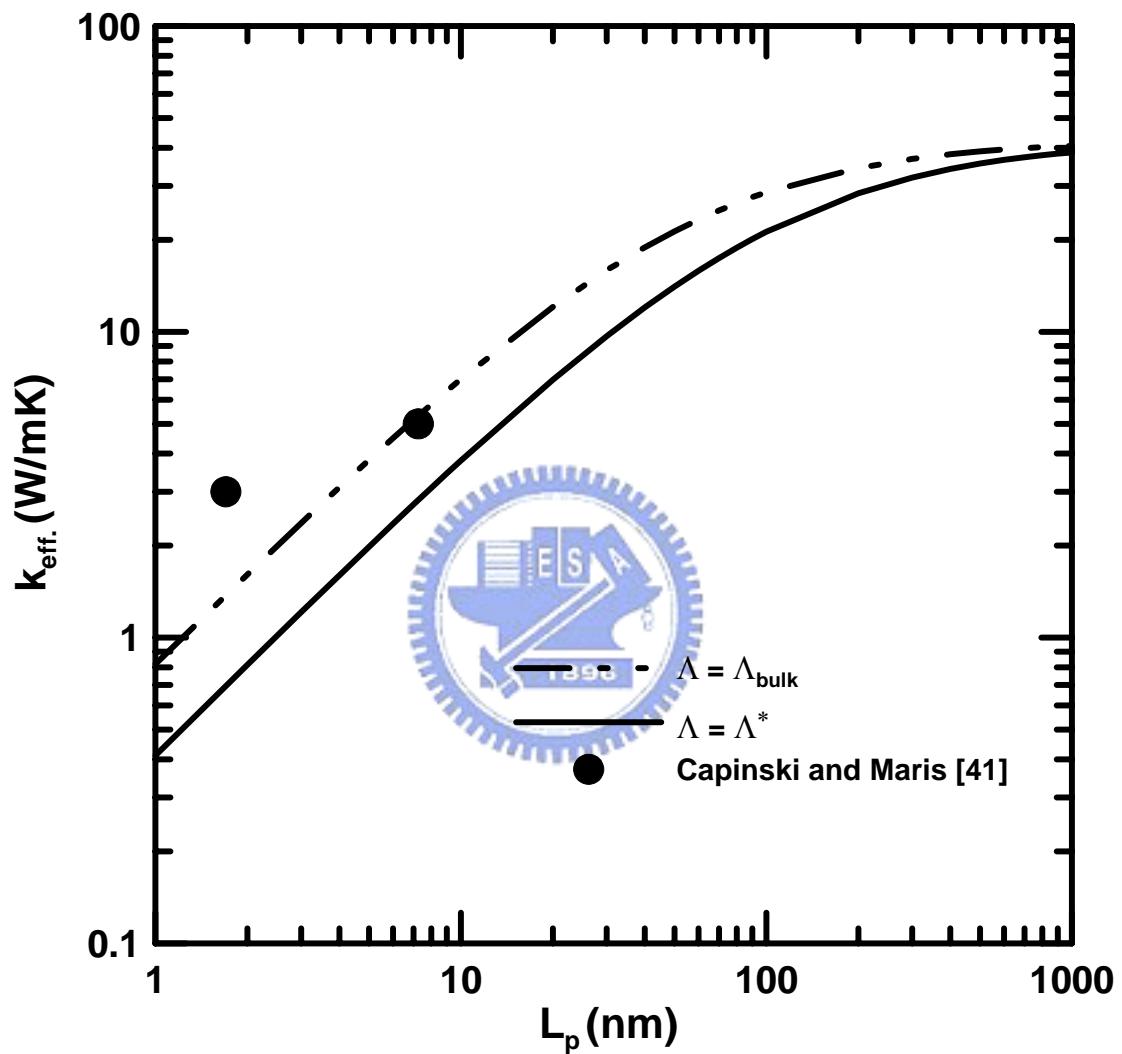


圖 4-22 GaAs/AlAs 超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，  
週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

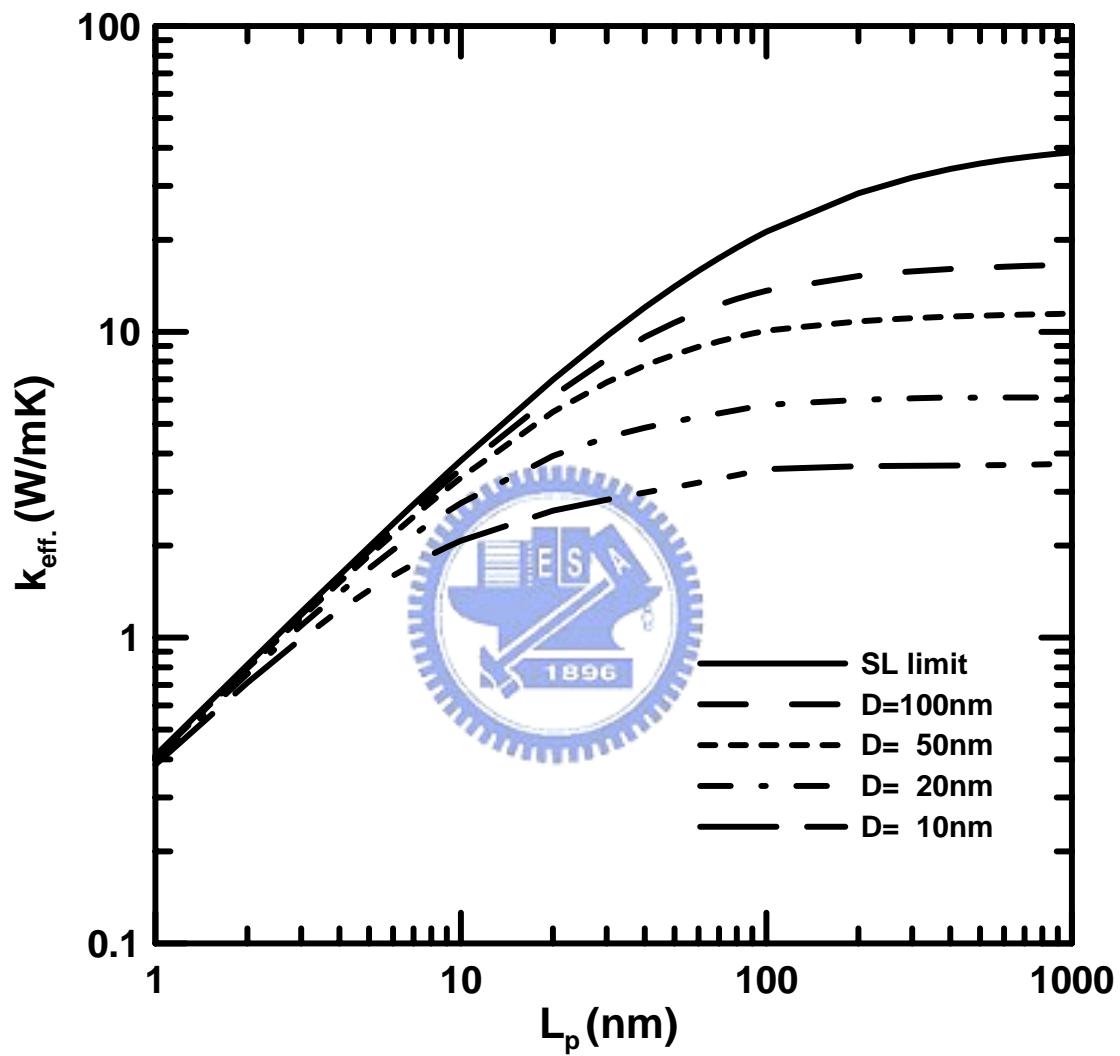


圖 4-23 GaAs/AlAs 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

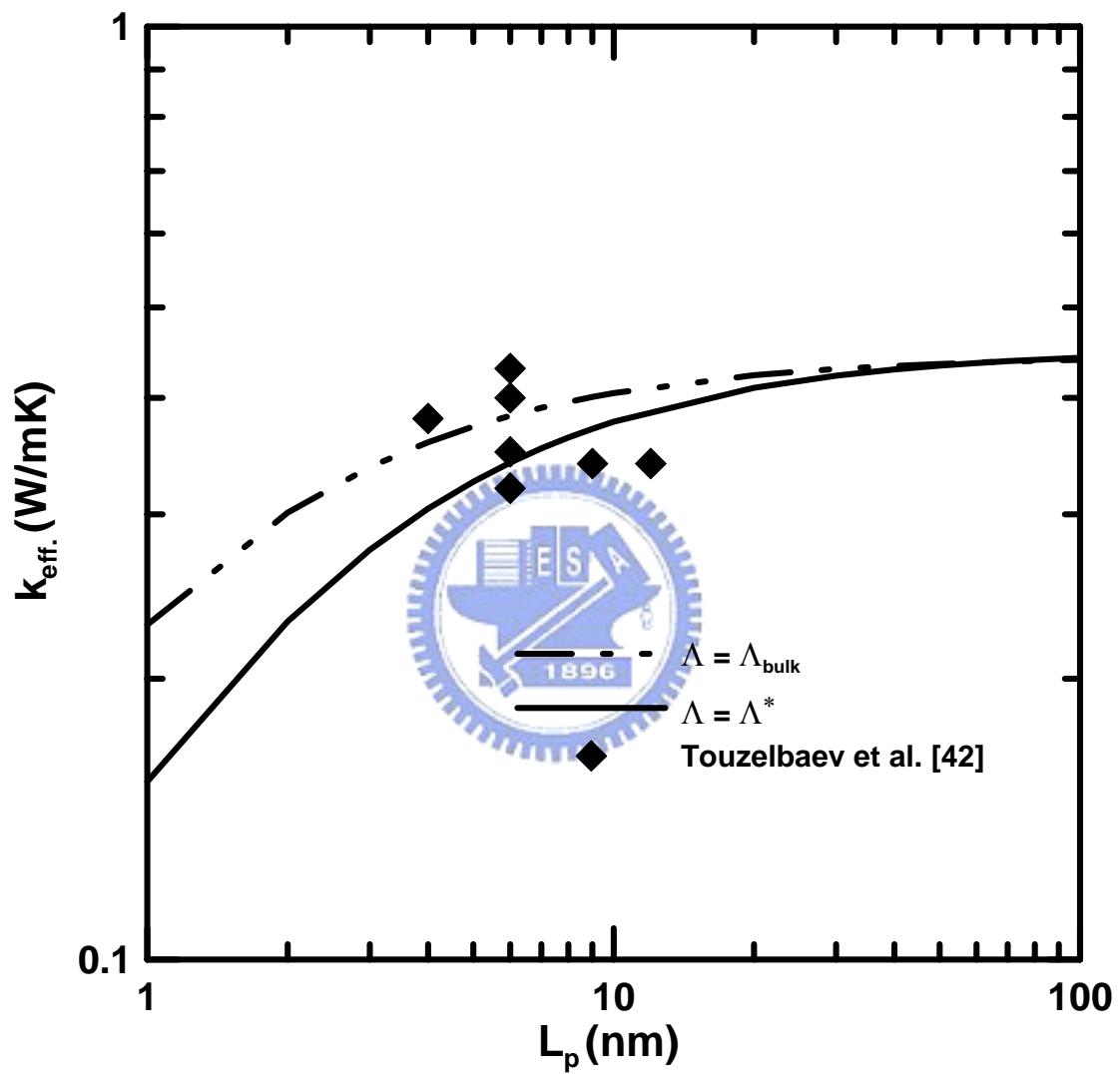


圖 4-24  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 超晶格結構，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

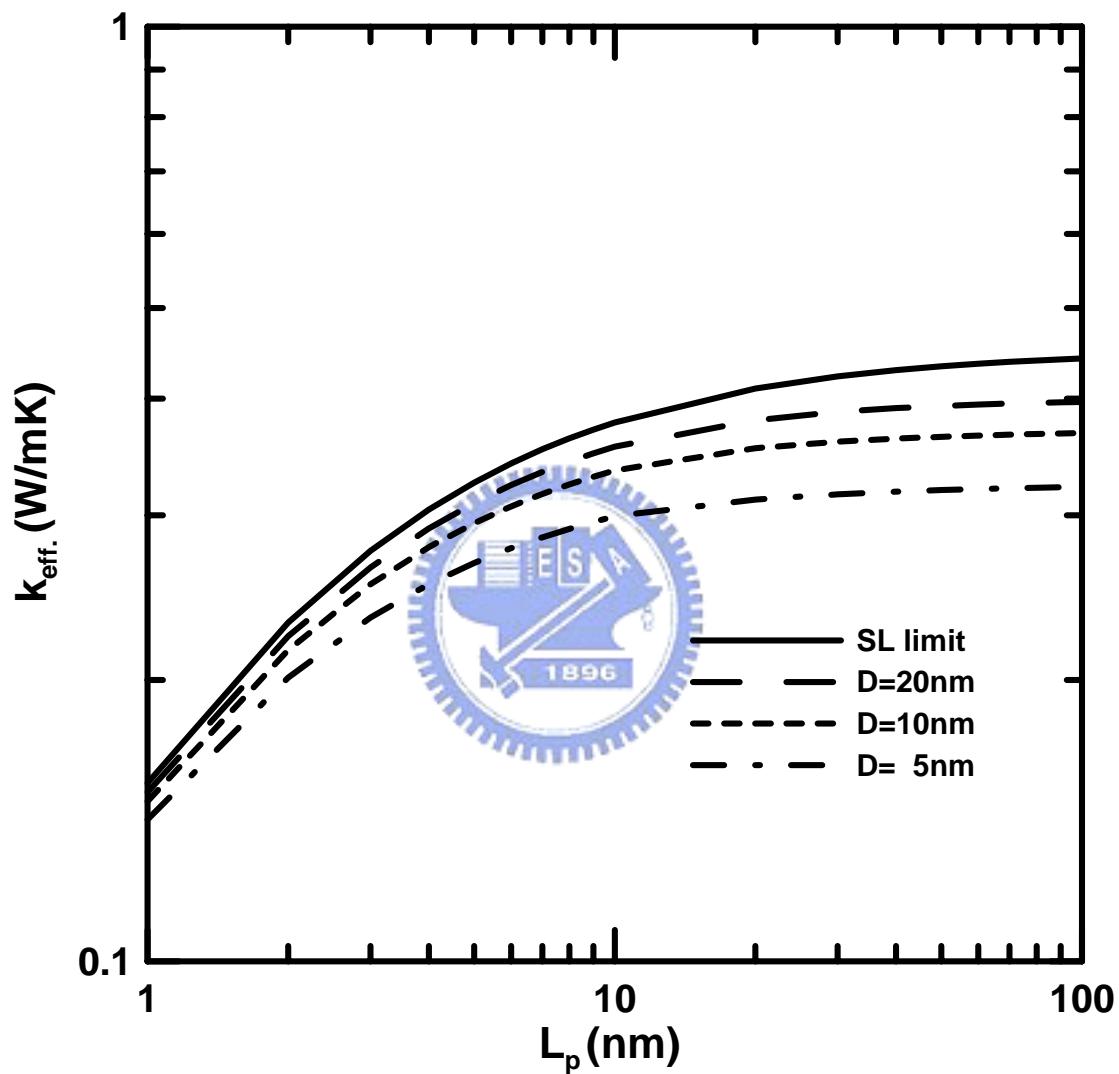


圖 4-25  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，直徑和週期厚度變化對等效熱傳導係數的分佈圖

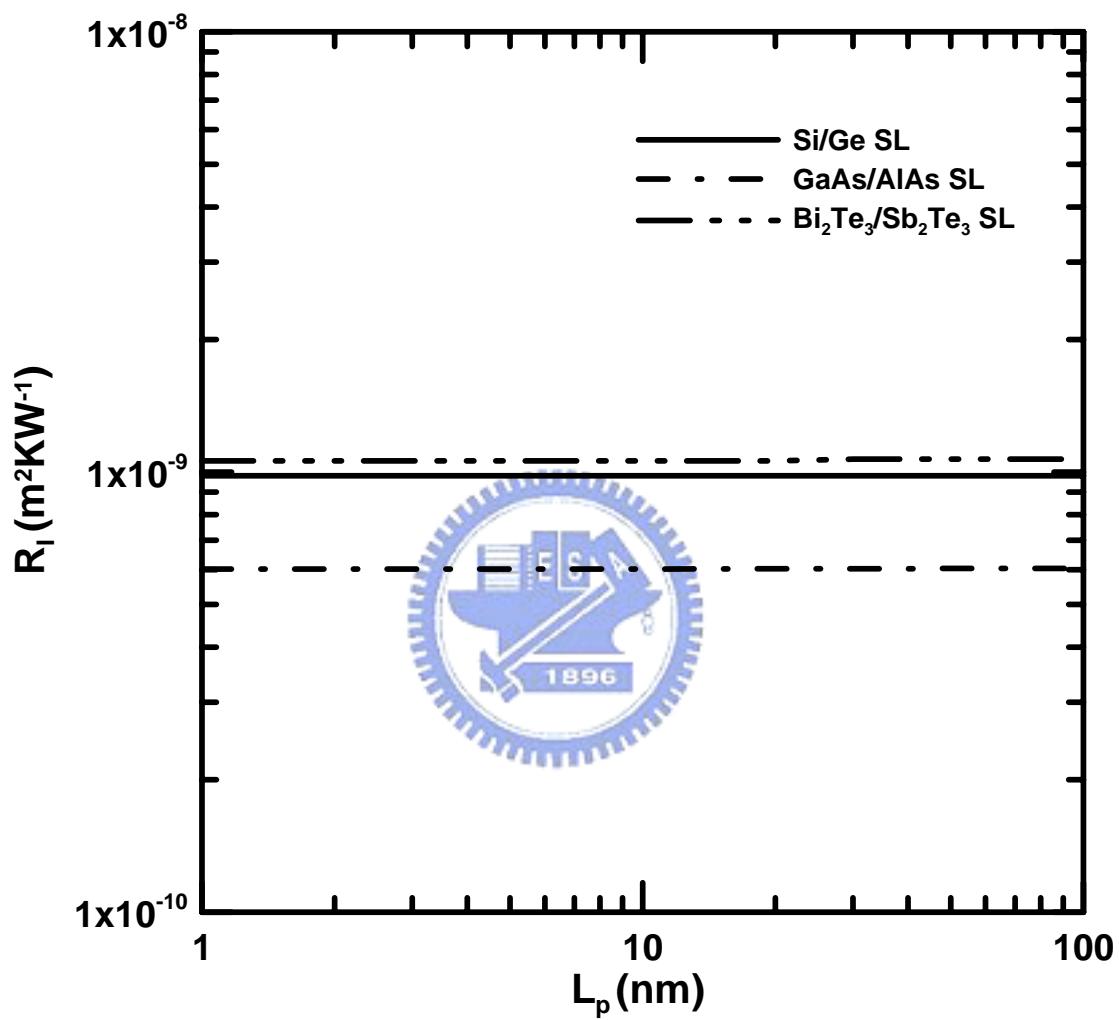


圖 4-26 Si/Ge、GaAs/AlAs 及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  超晶格結構，在室溫  
穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對界面熱阻的分佈圖

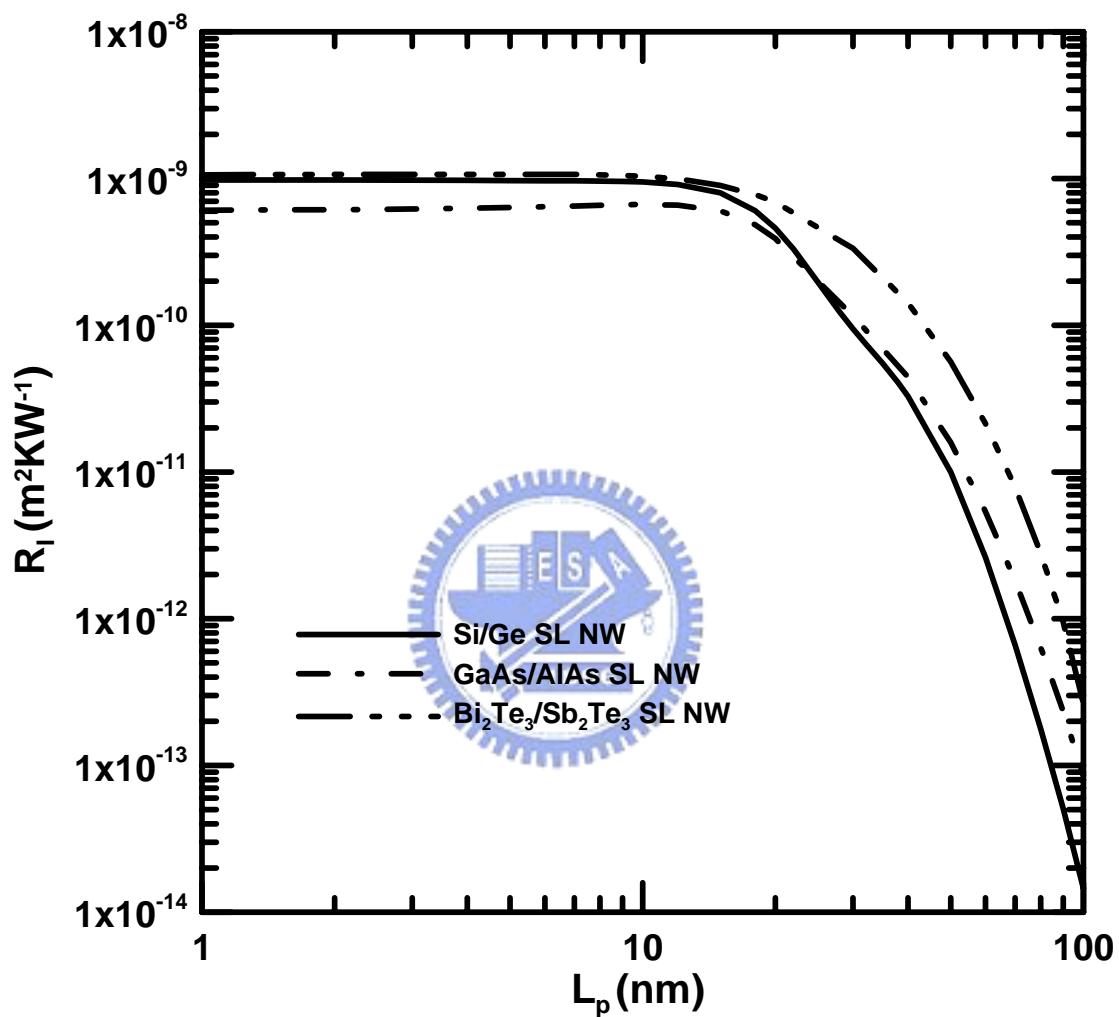


圖 4-27 直徑 20nm 的 Si/Ge、GaAs/AlAs 及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  超晶格奈米線，在室溫穩態定溫邊界條件下，週期厚度變化對界面熱阻的分佈圖

## 五、結論與建議

由於薄膜技術的進步，目前半導體製程的線寬已朝向 65nm 發展，電子散熱成為亟欲解決的棘手問題。體積小、重量輕的熱電致冷器是未來解決此一問題的方法之一，且目前認為利用超晶格奈米線製成的熱電材料能有效提升熱電致冷器的性能。而傳統巨觀的傅立葉熱傳導定律（Fourier's law）在奈米尺度下並不適用，本研究利用二維圓柱座標下的聲子輻射熱傳方程式搭配非彈性散異理論模式分析超晶格奈米線的熱傳行為，並考量微觀尺度下幾何尺寸對聲子平均自由徑的影響而進行修正，探討直徑、週期厚度、溫度及材料組成比率對超晶格奈米線等效熱傳導係數的影響，並期望本研究之分析結果，作為未來發展熱電致冷器時之參考。



本文綜合前一章的分析，得到以下七點結論：

1. 利用本研究修正後的聲子平均自由徑，模擬 $\text{Si}/\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ 超晶格奈米線的等效熱傳導係數比過去未作修正的結果低了約三分之一到二分之一左右，並縮小與Majumdar量測結果間的誤差百分之二十。
2. 超晶格奈米線的等效熱傳導係數受到軸向及徑向尺寸效應的影響，使得其等效熱傳導係數隨著週期厚度及直徑的縮小而降低，且尺寸效應發生於特徵長度接近或小於聲子平均自由徑時。另外，當直徑遠大於聲子平均自由徑時，超晶格奈米線的等效熱傳導係數逼近超晶格結構。
3. 超晶格奈米線的熱傳行為主要可以分為兩個部分。第一部份為週期厚度大於兩倍直徑時，此時在材料交界處沒有出現所謂溫度落

差 (Temp. drop) 的現象，因此本研究稱之為「奈米線結構」的熱傳行為；第二部分為週期厚度小於兩倍直徑時，此時受到「奈米線結構」及「超晶格結構」的共同影響，且由  $L_p/D$  參數決定何者的影響較大。當  $L_p/D$  趨近於零時，超晶格奈米線的熱傳行為趨近於超晶格結構；反之，當  $L_p/D$  趨近於二時，其熱傳行為趨近於奈米線結構。

4. 在超晶格奈米線的直徑及週期厚度固定下，材料組成比率會對其等效熱傳導係數造成影響。在熱傳行為接近超晶格結構時，其等效熱傳導係數隨著高熱傳導係數材料含量的增加而上升；而在熱傳行為接近奈米線結構時，其等效熱傳導係數反而隨著高熱傳導係數材料含量的增加而下降。
5. 比較 Si/Ge、GaAs/AlAs 及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  超晶格奈米線等效熱傳導係數隨直徑及週期厚度變化的情形。由於  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  及  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  的聲子平均自由徑僅約  $0.5\text{nm}$ ，因此  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  超晶格奈米線的尺寸效應影響幅度較其他兩種材料來的小且較晚發生。
6. 界面熱阻相較於在超晶格結構中與幾何尺寸無關的現象，在超晶格奈米線中大不相同。當週期厚度大於直徑時，受到邊界散射效應的影響，其界面熱阻隨著週期厚度的增加而急速下降。
7. 本研究之模擬方法是基於聲子波長遠小於結構的特徵尺寸下，忽略波動效應所發展出的，但當溫度小於  $30\text{K}$  時，聲子波長增加為  $300\text{K}$  溫度的十倍以上，波動效應的忽略受到挑戰，因此本文的模擬方法不適用於分析溫度低於  $30\text{K}$  以下或幾何尺寸  $10\text{nm}$  以下的超晶格奈米線。

對於朝此方向的研究，有以下三點建議：

1. 本研究在探討溫度變化對超晶格奈米線熱傳行為之影響時，深受材料參數不足之苦，期望未來研究能建立一套完整的材料參數資料庫，作為未來分析之用。
2. 因本研究引用的實驗值皆由國外研究單位所發表的論文中所獲得，期望未來能建立一套量測低維度結構（如超晶格結構、奈米線及超晶格奈米線等）等效熱傳導係數的實驗設備，提供作為理論模擬的參考依據，以期能更精確掌握低維度結構的熱傳性質。
3. 期望能同時考慮尺寸效應對電子電導率的影響，進一步分析尺寸效應對熱電材料熱電優值的影響，用以作為未來發展熱電致冷器的依據。



## 參考文獻

1. Rowe D. M., CRC Handbook of Thermoelectrics, CRC Press, 1995
2. Ashcroft N. W. and Mermin N. D., Solid State Physics, Australia, Singapore, 1976
3. Incropera F. P. and DeWitt D. P., Fundamentals of Heat and Mass Transfer, Wiley, New York, 2002.
4. Ren S. Y. and Dow J. D., "Thermal Conductivity of Superlattices," Physical Review B, Vol.25, pp. 3750-3755, 1982.
5. Yao T., "Thermal Properties of AlAs/GaAs Superlattices," Applied Physics Letters, Vol. 51, pp. 1798-1800, 1987.
6. Venkatasubramanian R., Siivola S.E., Colpitts T. and Q'Quinn B., "Thin-film Thermoelectric Devices with High Room-Temperature Figure of Merit," Natural, Vol. 413, pp. 597-602, 2001.
7. Chen G. and Shakouri A., "Heat Transfer in Nanostructures for Solid -State Energy Conversion," ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 124, pp. 242-252, 2002.
8. Majumdar A., "Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films," ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 115, pp. 7-16, 1993.
9. Prasher R., "Generalized Equation of Phonon Radiative Transport," Applied Physics Letters, Vol. 83, pp. 48-50, 2003.
10. Zeng T. and Liu W. "Phonon Heat Conduction in Micro- and Nano-core-shell Structures with Cylindrical and Spherical Geometries," Journal of Applied Physics, Vol.93, pp. 4163-4168, 2003.

- 11.Chen G. and Neagu M., “Thermal Conductivity and Heat Transfer in Superlattices,” Applied Physics Letters, Vol. 71, pp. 2761-2763, 1997.
- 12.Chen G., “Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures,” ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 119, pp. 220-229, 1997.
- 13.Chen G., “Thermal Conductivity and Ballistic-phonon Transport in the Cross-plane Direction of Superlattices,” Physical Review B, Vol. 57, pp. 14958-14973, 1998.
- 14.Hyldgaard P. and Mahan G. D., “Phonon Superlattice Transport,” Physical Review B, Vol. 56, pp. 10754-10757, 1997.
- 15.Tamura S., Tanaka Y. and Maris H. J., “Phonon Group Velocity and Thermal Conduction in Superlattices,” Physical Review B, Vol. 60, pp. 2627-2630, 1999.
- 16.Simkin M. V. and Mahan G. D., “Minimum Thermal Conductivity of Superlattices,” Physical Review Letters, Vol. 84, pp. 927-930, 2000.
- 17.Yang B. and Chen G., “Partially Coherent Phonon Heat Conduction in Superlattices,” Physical Review B, Vol. 67, pp. 195311-195314, 2003.
- 18.Venkatasubramanian R., “Lattice Thermal Conductivity Reduction and Phonon Localizationlike Behavior in Superlattice Structures,” Physical Review B, Vol. 61, pp. 3091-3097, 2000.
- 19.Fon W., Schwab K. C., Worlock J. M. and Roukes M. L., “Phonon Scattering Mechanisms in Suspended Nanostructures from 4 to 40K,” Physical Review B, Vol. 66, pp. 045302-045307, 2002.
- 20.Li D., Wu T., Kim P., Shi L., Yang P. and Majumdar A., “Thermal Conductivity of Individual Silicon Nanowires,” Applied Physics Letters, Vol. 83, pp. 2934-2936, 2003.

21. Volz S. G. and Chen G., "Molecular Dynamics Simulation of the Thermal Conductivity of Silicon Nanowires," *Applied Physics Letters*, Vol. 75, pp. 2056-2058, 1999.
22. Khitun A., Balandin A., Wang K. L. and Chen G., "Enhancement of the Thermoelectric Figure of Merit of  $Si_{1-x}Ge_x$  Quantum Wires Due to Spatial Confinement of Acoustic Phonons," *Physica E*, Vol. 8, pp. 13-18, 2000.
23. Zou J. and Balandin A., "Phonon Heat Conduction in a Semiconductor Nanowire," *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, pp. 2932-2938, 2001.
24. Lu X., Shen W. Z. and Chu J. H., "Size Effect on the Thermal Conductivity of Nanowires," *Journal of Applied Physics*, Vol. 91, pp. 1542-1552, 2002.
25. Mingo N., Yang L., Li D. and Majumdar A. "Predicting the Thermal Conductivity of Si and Ge Nanowires," *Nano Letters*, Vol. 3, pp. 1713-1716, 2003.
26. Wu Y., Fan R. and Yang P., "Block-by-Block Growth of Single Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires," *Nano Letters*, Vol. 2, pp. 83-86, 2002.
27. Lin Y. and Dresselhaus M.S., "Thermoelectric Properties of Superlattice Nanowires," *Physical Review B*, Vol. 68, pp. 075304-075318, 2003.
28. Dames C. and Chen G., "Theoretical Phonon Thermal Conductivity of Si/Ge Superlattice Nanowires," *Journal of Applied Physics*, Vol. 95, pp. 682-693, 2004.
29. Kittle C., *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York, 1986.
30. Chen Y., Li D., Yang J., Wu Y., Lukes J. F. and Majumdar A.,

- “Molecular Dynamics Study of the Lattice Thermal Conductivity of Kr/Ar Superlattice Nanowires,” *Physica B*, Vol. 349, pp. 370-380, 2004.
31. Little W. A., “The Transport of Heat Between Dissimilar Solids at Low Temperature,” *Can. J. Phys.*, Vol. 37, pp. 334-349, 1959.
32. Swartz E. T. and Pohl R. O., “Thermal Boundary Resistance,” *Reviews of Modern Physics*, Vol. 61, pp. 605-668, 1989.
33. Phelan P. E., “Application of Diffuse Mismatch Theory to the Prediction of Thermal Boundary Resistance in Thin-Film High-T<sub>c</sub> Superconductors,” *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 120, pp. 37-43, 1998.
34. Prasher R. S. and Phelan P. E., “A Scattering-Mediated Acoustic Mismatch Model for the Prediction of Thermal Boundary Resistance,” *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 123, pp. 105-112, 2001.
35. Majumdar A., “Thermoelectricity in Semiconductor Nanostructures,” *Science*, Vol. 303, pp. 777-778, 2004.
36. Modest M. F., *Radiative Heat Transfer*, Academic, New York, 2003.
37. da Silva L. W., and Kaviany M., “Micro-thermoelectric Cooler: Interfacial Effects on Thermal and Electrical Transport,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 47, pp. 2417-2435, 2004.
38. <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/semicond/>.
39. Li D., Wu Y., Fan R., Yang P. and Majumdar A., “Thermal Conductivity of Si/SiGe Superlattice Nanowires,” *Applied Physics Letters*, Vol. 83, pp. 3186-3188, 2003.
40. Lee S.-M., Cahill D. and Venkatasubramanian R., “Thermal Conductivity of Si-Ge Superlattices,” *Applied Physics Letters*, Vol. 70,

pp. 2957-2959, 1997.

41. Capinski W. S. and Maris H. J., "Thermal Conductivity of GaAs/AlAs Superlattices," *Physical B*, Vol. 219, pp. 699-701, 1996.
42. Touzelbaev M. N., Zhou P., Venkatasubramanian R. and Goodsen K, "Thermal Characterization of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  Superlattices," *Journal of Applied Physics*, Vol. 90, pp. 763-767, 2001.

