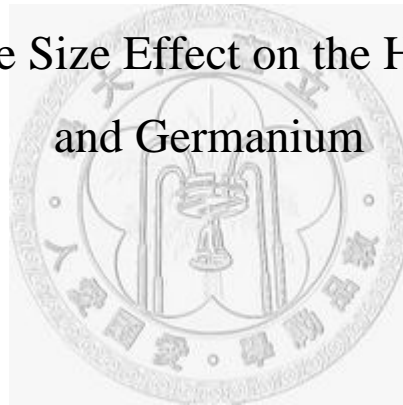


國立臺灣大學工學院機械工程學系
碩士論文

Department of Mechanical Engineering
College of Engineering
National Taiwan University
Master Thesis

尺寸效應對矽鍺材料熱傳現象影響之研究

An Investigation of the Size Effect on the Heat Transfer in Silicon
and Germanium



康庭瑜

Ting-Yu Kang

指導教授：黃美嬌 博士

Advisor: Mei-Jiau Huang, Ph.D.

中華民國99年7月

July 2010

國立臺灣大學碩士學位論文
口試委員會審定書

尺寸效應對矽鍺材料熱傳現象影響之研究
An investigation of the size effect on the heat transfer in
Silicon and Germanium

本論文係康庭瑜君 (R97522314) 在國立臺灣大學機械工程學系
完成之碩士學位論文，於民國九十九年七月二十日承下列考試委員審
查通過及口試及格，特此證明

口試委員：

黃美嬌

(指導教授)

李石頓

楊照彥

宋齊有

吳宗信

系主任

張所鎰

黃美嬌

李石頓

楊照彥

宋齊有

吳宗信

張所鎰

誌 謝

本論文的完成，首先要感謝指導教授黃美嬌老師這段時間在研究上不厭其煩地指導與幫助，更謝謝老師在課業以外的關心及對做事態度的指正。在研究遇到瓶頸時，也往往在經老師指點及引導後能夠順利突破，讓本論文的研究得以順利完成。在此致上最誠摯的感謝。

感謝本論文的口試委員李石頓、楊照彥、宋齊有與吳宗信教授百忙之中撥冗參與口試審查，並給予寶貴的意見。

感謝同實驗室的夥伴們：學姊劉亮君，學長張泰鳴、張天曜、蕭百佑、Alex Ferguson、陳立杰、翁健洲、謝曙陽、蔡東峻以及學妹黃千榕、洪艾蒂，在研究所生涯中，相互的學習與砥礪，能夠與他們成為實驗室的一員，實屬榮幸。另外，特別感謝學長張泰鳴在實驗室電腦設備的維護，得以讓我們有良好的環境進行研究。

感謝同為熱流組的同學們：陳智仁、方爾凱、張書凱、邱明峻、陳任鈞、陳文昌、馮智凱、陳文進、謝恆盛、小綠、又元、啟安等，在課業上的幫助以及生活上的相互砥礪，讓我這兩年學習到許許多多在課業外的事物，增廣我的見識，並且多次的戶外活動讓我生活增添許多風采。

最後，感謝父母親與姐姐以及女友溫如在背後的支持，由於他們在經濟與精神上的支持，才能讓我無後顧之憂，且開心的度過研究所的歲月。

中文摘要

本論文以蒙地卡羅法(MC)模擬工具研究半導體材料奈米結構之聲子傳輸現象。在求解聲子波茲曼方程式過程中，本質散射部份採用單一鬆弛時間近似法，而聲子性質方面則使用灰介質假設，並以實驗量測之色散關係來計算其平均性質；配合適當的材料介面物理模型與數值邊界條件，並利用存在於系統中的對稱條件來減少計算量。研究方向主要分為兩方面：一是針對矽-鍺奈米線複合材料，探討邊界與異質介面對熱傳之影響；二是探討尺寸效應對擴散熱阻的影響。

對於矽-鍺奈米線複合材料，研究發現若邊界或異質介面為完全粗糙，則介面密度主宰複合材料的熱傳能力，介面密度愈高，熱傳能力愈差；對於光滑介面，則同時受到不同材料之本質散射與介面密度的影響，因此存在一個臨界介面密度，在該臨界介面密度下熱傳導係數達到最小。另外，研究結果建議以較低導熱性材料作為連續熱傳主體，而較高導熱性材料作為內嵌奈米線，可得到較低的等效熱傳導係數。

在尺寸效應對擴散熱阻影響之的研究中，熱乃自一狹窄加熱線沿膜厚方向傳入一相對寬廣的矽薄膜材料，出口邊界乃給定一自由流及一定常熱對流熱傳係數。研究首先比較等向且固定熱傳導係數下之理論解析解與模擬解之差異，從中驗證程式的準確性與瞭解薄膜材料熱傳導係數的不等向性及溫度相依性對溫度分布之影響。接著比較塊材與奈米材料模擬解之異同，研究發現：由於奈米材料尺寸小於聲子平均自由路徑，聲子發生內部散射的機率較小，易向各方向傳達，因此在相同幾何比例下，奈米材料之擴散熱阻會高於塊材。本研究彰顯出擴散熱阻在奈米應用中的重要性。

關鍵字：蒙地卡羅法、熱傳導係數、奈米複合材料、介面密度、尺寸效應、擴散

熱阻、熱對流傳導係數



Abstract

The phonon transport phenomenon in solids was simulated via a Monte-Carlo(MC) simulator , which solves the phonon Boltzmann transport equation under the single mode relaxation time approximation and the gray medium approximation. Physical models for heterogeneous interfaces and numerical boundary conditions are properly designed and implemented. Most of all, we take advantage of the geometric symmetry that exists in a system to reduce the computational amount. We focus our work on investigating the effect of the heterogeneous interfaces and boundaries on the thermal conductivity of Si/Ge nanocomposites and the size effect on the spreading thermal resistance.

For Si/Ge nanocomposites, the investigation results indicate the thermal conductivity significantly reduces with increasing interface density when the interfaces are totally diffuse. When the interfaces are smooth, the thermal conductivities are dominated not only by the interface density but also the intrinsic properties of the components of composites. A critical density ratio is thus resulted with a corresponding minimum thermal conductivity. Furthermore, the investigation results also show that a lower thermal conductivity can be expected by using lower

thermal conductivity material in matrix and the higher in wire.

For the size effect on the spreading thermal resistance, the simulated system is a silicon film heated by a narrow heating wire placed on the top surface of the film and cooled by the ambient atmosphere with a constant temperature and convection heat transfer coefficient on the bottom surface. Comparisons were made between the simulation results at micro-scale and the analytical solutions of the thermal diffusion equation as well as between films at micro- and nano- scales. The former verifies the importance of the anisotropy and temperature dependence of the film thermal conductivity. The latter shows an increased spreading-resistance fraction of the total film thermal resistance when the system is scaled down due to the ballistic behaviors of phonons. This paper reveals the importance of spreading resistance in applications at nanoscale.

Key words: Monte-Carlo simulation, thermal conductivity, nanocomposite, interface density, size effect, spreading resistance, convection heat transfer coefficient

目錄

口試委員會審定書	i
誌謝	ii
中文摘要	iii
英文摘要	v
目錄	vii
表目錄	x
圖目錄	xii
符號說明	xv
第一章 緒論.....	1
1-1 研究背景.....	1
1-2 研究動機及目的.....	6
1-3 論文架構.....	6
第二章 基本理論與模擬方法.....	7
2-1 基本理論.....	7
2-1-1 聲子波茲曼傳輸方程式.....	7
2-1-2 灰介質假設.....	8
2-1-3 介面穿透模型.....	9
2-2 蒙地卡羅法工具.....	10
2-2-1 初始條件.....	10
2-2-2 對稱條件.....	11

2-2-3	聲子分解運算.....	11
2-2-4	邊界條件.....	12
2-2-5	模擬流程.....	15
第三章 矽-鍍奈米線複合材料之熱傳分析.....		17
3-1	矽-鍍奈米線複合材料垂直軸方向之熱傳.....	17
3-1-1	週期測試.....	17
3-1-2	溫度及熱通量分布.....	18
3-1-3	等效熱傳導係數.....	18
3-1-3a	粗糙介面.....	18
3-1-3b	光滑介面.....	20
3-2	矽-鍍奈米線複合材料平行軸方向之三維熱傳.....	21
3-2-1	平行處理.....	21
3-2-2	模擬區間測試.....	21
3-2-3	溫度及熱通量分布.....	22
3-2-4	等效熱傳導係數.....	23
3-2-4a	絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$).....	23
3-2-4b	週期性邊界.....	23
第四章 尺寸效應對擴散熱阻之影響.....		25
4-1	塊材尺寸模擬與理論解.....	25
4-1-1	塊材理論解析解.....	26
4-1-2	固定熱傳導係數模擬結果.....	27
4-1-3	溫度相依熱傳導係數模擬結果.....	28
4-2	尺寸效應.....	29
4-2-1	溫度與熱通量分布.....	29

4-2-2	擴散熱阻、熱對流熱阻與厚度熱阻之比例關係.....	30
第五章	結論與未來展望	33
5-1	結論 — 矽-鍺奈米線複合材料.....	33
5-2	結論 — 尺寸效應對擴散熱阻之影響	34
5-3	未來展望	34
參考文獻		36



表目錄

表 3.1	Ge(Si)粗糙介面週期測試的模擬參數.....	40
表 3.2	Ge(Si)光滑介面週期測試的模擬參數.....	40
表 3.3a	粗糙介面 $L_1=10\text{nm}$ 的模擬參數，模擬區間為 1×3 週期.....	41
表 3.3b	粗糙介面 $L_1=50\text{nm}$ 的模擬參數，模擬區間為 1×3 週期.....	42
表 3.4	Si(Ge)光滑介面的模擬參數.....	43
表 3.5	Ge(Si)光滑介面的模擬參數.....	44
表 3.6	絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B=0$) 網格測試的模擬參數.....	45
表 3.7	週期性邊界網格測試的模擬參數.....	45
表 3.8a	絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B=0$)， $L_1=10\text{nm}$ 的模擬參數.....	46
表 3.8b	絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B=0$)， $L_1=50\text{nm}$ 的模擬參數.....	47
表 3.9a	週期性邊界， $L_1=10\text{nm}$ 的模擬參數.....	48
表 3.9b	週期性邊界， $L_1=50\text{nm}$ 的模擬參數.....	49
表 4.1	與理論解比較之塊材尺寸的模擬參數.....	50
表 4.2	塊材模擬結果與解析解比較，標示 S 為模擬結果，標示 T 則為理論解.....	50
表 4.3	矽薄膜 $2b=50\mu\text{m}$ 、 500nm 的模擬參數.....	51
表 4.4	塊材與奈米尺寸下的模擬參數.....	52

表 4.5 解析解、塊材與奈米材料模擬結果比較 ($k_{bulk}=134.25 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$) 53

表 5.1 垂直平面方向之超晶格薄膜中加入 T 型結構之模擬參數。其中
 $L = L_3 = L_4$ 53



圖目錄

圖 2.1	實驗量測之矽(左)、鍺(右)[100]方向的色散關係曲線圖[44] ...	54
圖 2.2	實驗量測之矽(正方形)、鍺(三角形)的塊材熱傳導係數圖[2]..	54
圖 2.3	矽-鍺奈米線複合材料垂直軸方向截面圖.....	55
圖 2.4	聲子在三維網格中初始位置 P 的示意圖.....	55
圖 2.5	蒙地卡羅法之模擬流程圖.....	56
圖 3.1	3×3 個週期模擬示意圖.....	57
圖 3.2a	介面光滑係數 $P=0$ ，1×1、1×3、1×5 週期之穩態無因次溫度分布圖.....	58
圖 3.2b	介面光滑係數 $P=0$ ，3×3 週期之穩態無因次溫度分布圖.....	59
圖 3.3	介面光滑係數 $P=1$ ，1×3、1×5 週期之穩態無因次溫度分布圖	60
圖 3.4	鍺包覆矽奈米線—10nm 之複合材料內溫度分布圖.....	61
圖 3.5	鍺包覆矽奈米線—10nm 之複合材料截面上熱通量分布圖.....	61
圖 3.6	粗糙介面的模擬結果.....	62
圖 3.7	假設一維穩態熱傳導之熱阻示意圖及忽略介面影響之等效熱傳導係數.....	63
圖 3.8	與前人[27,32]比較之等效熱傳導係數.....	63
圖 3.9	光滑介面矽包覆鍺的模擬結果.....	64
圖 3.10	光滑介面鍺包覆矽的模擬結果.....	64
圖 3.11	3-2 節欲研究之材料示意圖.....	65
圖 3.12	左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界其中間截面的熱通量分布圖；右圖則代表與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界的熱通量分布圖.....	65

圖 3.13	左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界，其在三個截面下的溫度分布；右圖則為與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界其溫度分布圖.....	66
圖 3.14	左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界，其熱傳方向平均溫度分布；右圖則為與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界其溫度分布圖.....	66
圖 3.15	Ref [42]之計算模型示意圖	67
圖 3.16	垂直熱傳方向的邊界為絕熱邊界(粗糙介面)之模擬結果.....	67
圖 3.17	(a)為鍺材料內嵌矽奈米管示意圖。(b)為前人[43]以同心圓材料加上鏡反射邊界來近似之示意圖.....	68
圖 3.18	垂直熱傳方向的邊界為週期性邊界的模擬結果.....	68
圖 4.1	擴散熱阻之模擬模型示意圖.....	69
圖 4.2	二維穩態熱傳解析解收斂測試.....	70
圖 4.3	不考慮熱傳導係數為溫度的函數之模擬結果誤差圖.....	71
圖 4.4	矽薄膜模擬示意圖.....	71
圖 4.5	解析解(黑線)與模擬(紅線)無因次溫度， $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ ，等高線圖.....	72
圖 4.6	考慮熱傳導係數為溫度的函數之模擬結果誤差圖.....	72
圖 4.7	塊材(紅色方形)及奈米材料(藍色三角形)在 $x/t = 0.05$ (左圖)、 0.95 (右圖)處截面上的熱通量分布圖.....	73
圖 4.8	塊材(紅色方形)及奈米材料(藍色三角形)在對流邊界 $x/t = 0.975$ 截面的溫度分布圖.....	73
圖 4.9	膜厚 $5\mu\text{m}$ 與 50nm (a)， $10\mu\text{m}$ 與 100nm (b)， $15\mu\text{m}$ 與 150nm (c)， $20\mu\text{m}$ 與 200nm (d)， $25\mu\text{m}$ 與 250nm (e)，無因次溫度， $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ ，等高線圖.....	74
圖 4.10	擴散熱阻所佔總熱阻之比例.....	75

圖 4.11	擴散熱阻佔膜熱阻之比例.....	75
圖 5.1	矽-鍺奈米結構，熱傳導係數隨介面密度(單位體積的介面面積)之 變化圖.....	76
圖 5.2	加入 T 型結構之超晶格薄膜的模擬示意圖	77
圖 5.3	模擬 2×1 週期之中間週期之穩態後的時間平均溫度分布圖	78
圖 5.4	x 方向四個截面之熱通量分布圖.....	79
圖 5.5	加入 T 型結構之 Si/Ge 超晶格薄膜熱傳導係數與 Si(d)/Ge(d), $P=0$, 垂直平面方向等效熱傳導係數隨超晶格週期($2d$)之變化圖[41].	79



符號說明

一般符號

A	一維問題下 y - z 平面方向的截面積	nm^2
A_b	網格截面積	nm^2
C	比熱	$\text{J/kg}\cdot\text{K}$
D	組態密度	s/m^3
e	T 型結構之尺寸	nm
E	離開邊界的總能量	meV
f	T 型結構之尺寸	nm
g	T 型結構之尺寸	nm
h	熱對流傳導係數	$\text{W/m}^2\cdot\text{K}$
\hbar	普郎克常數(Planck constant)	$\text{J}\cdot\text{s}$
k_B	波茲曼常數(Boltzmann constant)	J/K
k	等效熱傳導係數	$\text{W/m}\cdot\text{K}$
L_1	複合材料的內嵌材料尺寸	nm
L_2	複合材料的外圍材料尺寸	nm
L_3	加入 T 型結構之超晶格矽薄膜厚度	nm
L_4	加入 T 型結構之超晶格鍺薄膜厚度	nm
n	聲子分布函數	--
n_o	聲子局部平衡時的分布函數	--
\bar{n}	聲子數量密數	$1/\text{nm}$
N_{percell}	初始網格聲子數目	--
p	極化	--
P	介面光滑係數	--

P_B	邊界光滑係數	--
P_S	本質散射之機率	--
\bar{q}	波向量	1/m
q''	熱通量	meV/ps·nm ²
q_0''	平均熱通量	meV/ps·nm ²
r	0~1 間的均勻亂數	--
\bar{r}	聲子位置	nm
R	熱阻	K/W
R^*	正常化之熱阻	m·K/W
t	時間	ps
T	絕對溫度	K
T_0	初始溫度	K
U	內能	eV/nm ³
\mathcal{V}	網格體積	nm ³
W	聲子束中所具有的聲子數目	--
x	直角座標	nm
y	直角座標	nm
z	直角座標	nm
Z	聲學阻抗	kg/m ² ·s

希臘符號

Δt	步階時間	ps
Δx	x 方向網格大小	nm
Δy	y 方向網格大小	nm
Λ	聲子平均自由路徑	nm
θ	聲子群速與 x 軸(或介面法線)之夾角	--
φ	聲子群速投影分量與 y 軸之夾角	--

ρ	材料密度	kg/m ³
τ	鬆弛時間(relaxation time)	ps
τ_{ij}	穿透率	--
v_g	聲子群速度	nm/ps
ω	聲子頻率	1/s
ϕ_{Si}	矽材料佔整體材料之體積比	--

下標

+ 入口邊界

- 出口邊界

avg 平均值

bulk 塊材

Ge 鍺材料

Si 矽材料

上標

- 平均值



第一章 緒論

1-1 研究背景

溫室效應一直以來皆是人類所專注的課題，減少人為活動所造成的溫室氣體產生源是許多研究團隊的目標，在一般傳統的蒸氣動力廠、冷卻系統，需要排放大量的溫室氣體與產生氟氯碳化物，對於環境帶來一定的衝擊，熱電發電器的應用為一值得探索的領域。

熱電元件主要由 P 型與 N 型半導體互相排列組成，其中 N 型半導體內的載子為電子，P 型半導體內的載子為電洞，而兩半導體間以一般導體相連接成一直流串聯電路。輸入電流，利用熱電效應可達到致冷效果，反之，亦可利用溫差達到發電的目的。熱電元件不需壓縮機、冷媒，無環保公害且具有低噪音、小型化、維護性高、可靠度高等特質。然而，受材料限制，熱電轉換效率遠較傳統壓縮機系統為差，因此在實際應用上並不廣泛。

熱電元件的效率主要決定於熱電材料的熱電優值(ZT 值, figure of merit)， $ZT = S^2 \sigma T / (k_l + k_e)$ ，其中 S 為賽貝克係數(Seebeck coefficient)， k_l 為晶格熱傳導係數， k_e 為電子熱傳導係數， σ 為導電係數， T 為絕對溫度[1]。 ZT 值越高代表效率越好，由於 ZT 值正比於導電係數但反比於熱傳導係數，因此好的熱電材料需擁有極佳的導電特性(例如金屬)且同時擁有極差的導熱性(例如絕緣體)，這與我們所認知的一般材料特性(高導電性其導熱性亦佳，低導電性其導熱性亦差)迥然不同。半導體材料擁有金屬與絕緣體的部份特性，其導電性略差於金屬，卻有極差的導熱性，是較佳的熱電材料。在過去的研究中，Glassbrenner 與 Slack[2]量測矽、鍺材料其熱傳導係數從 3K 至熔點的變化。Holland[3,4]考慮邊界散射

(boundary scattering)、雜質散射(impurity scattering)及三聲子散射(three-phonon scattering)，使用鬆弛時間(relaxation time)概念來建立 Si、Ge 與 InSb、GaAs、GaSb、CdTe、CdS 材料其熱傳導係數隨溫度變化的模型。

在傳統熱電材料中， ZT 值通常在 1 以下，一般認為 ZT 值要達到 3 以上才能有更大的應用範圍[5]。近年來在理論及實驗[6,7]上發現低維度(low-dimensional)的材料，像是量子井(quantum wells)、量子線(quantum wires)、量子點(quantum dots)與超晶格結構，其 ZT 值比傳統塊材材料來得大很多。由於減少材料維度會改變其能帶結構(band structure)，費米能階(Fermi energy)附近的態密度(density of state)有機會增大，聲子的色散關係(phonon dispersion relation)亦會發生變化(聲子群速減少)，同時導致能量過濾(energy-filtering)效應與增加聲子的介面散射，使得功率因子(power factor) $S^2\sigma$ 提高，同時材料晶格熱傳導係數下降，因此提升了 ZT 值。

超晶格薄膜由兩種以上的異質材料以週期性堆疊而成，每一層薄膜約只有幾十個奈米。在前人的實驗中，Yao [8]發現 AlAs/GaAs 超晶格薄膜沿平面方向之熱傳導係數及熱擴散係數大於 AlGaAs 合金，約只為 AlAs/GaAs 塊材平均值的一半；而 Yu et al.[9,10]量測 GaAs/AlAs 超晶格薄膜熱傳導係數與熱擴散係數隨溫度變化的情形，發現其熱性質的溫度相依性較塊材材料弱；他們同時針對 GaAs/AlAs、GaAs/AlGaAs 超晶格薄膜及 Si 薄膜材料的熱擴散係數進行調查，並比較量測方式的優劣。而後 Liu et al. [11] 及 Yang et al. [12]分別量測了 Si/Ge 超晶格薄膜在垂直平面(cross-plane)及平行平面(in-plane)方向的熱傳導係數與溫度變化之關係，觀察到垂直平面方向之熱傳導係數明顯來得比平行平面方向為小，垂直平面方向超晶格薄膜其 ZT 值約為矽塊材四倍。Venkatasubramanian et al.[13,14] 發現在室溫下，P-type $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 超晶格薄膜之 ZT 值高於 Bi_2Te_3 合金可至 2.4、N-type $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Bi}_2\text{Te}_{2.83}\text{Se}_{0.17}$ 超晶格薄膜也可提昇至 1.4 左右。

從準備材料、架設實驗設備到進行量測，需要付出相當大的實驗費用與時間，以理論分析來對於奈米材料結構與設計進行探討，可以給予實驗者在趨勢、設計參數等方面的建議，像是在材料的選擇、粒子的顆粒分布及為增加聲子散射的機制等方面上皆有很大的幫助。

在半導體中之熱流主要由聲子(phonon)來傳遞，其傳輸現象可以波茲曼傳遞方程式(Boltzmann Transport Equation, BTE)來描述，其中散射現象多以單一鬆弛時間法(single mode relaxation time, SMRT)來簡化。一般考慮的聲子散射機制主要有：三聲子散射(three-phonon scattering)、邊界散射(boundary scattering)、質量差異散射(mass-difference scattering)、聲子和電子的散射(phonon-electron scattering)等 [15]，而後利用馬德生法則(Mathiessen's rule)將以上的散射效應合併。另外，奈米尺度下需要特別注意其邊界效應的影響。邊界所造成的影響主要有二，其一為改變聲子之色散關係，降低了聲子的群速，其二為影響聲子之分布情形，修改了計算熱傳導係數之公式，使得在奈米尺度下熱傳導係數有顯著之變化。

回顧前人的理論研究方面，Hyldgaard & Mahan[16]分析 GaAs/AlAs 超晶格薄膜平面方向之熱傳導係數，單層薄膜厚度範圍在 5~50nm，分析過程中假設等向性的塊材色散關係，以及各個極化有相同的最大波向量，並重新推導在超晶格薄膜下的聲子分布函數。Balandin 和 Wang[17]及 Khitun et al.[18]分別計算矽奈米薄膜及奈米管晶格熱傳導係數，分析過程中假設塊材與奈米結構有相同的德拜溫度，不考慮因尺寸效應對於聲子分布函數的改變而考慮受尺寸效應影響的聲子色散關係。計算結果發現奈米薄膜及奈米管的熱傳導係數會下降一個數量級，且奈米管的熱傳導係數又較奈米薄膜來得低。Zou 和 Balandin[19]同時考慮受尺寸效應限制的聲子色散關係與受邊界影響的分布函數，在相同特徵尺寸(20nm)下，計算所得之薄膜熱傳導係數約為奈米管的兩倍。Prasher[20]針對多孔性材料(圓孔)

推導在聲子平均自由路徑與孔徑和孔間距相當時可適用之聲子傳輸理論模型，而由研究結果發現孔徑較小其尺寸效應越明顯，等效熱傳導係數越高。Chen [21,22]先研究 GaAs/AlAs 平行平面方向超晶格薄膜，考慮異質介面的粗糙度，包括完全鏡反射、完全亂反射與部份鏡反射部分亂反射，使用正弦(sine)色散關係計算出超晶格薄膜平行平面方向的熱傳導係數。而後採用線性的色散關係來計算超晶格薄膜垂直平面方向。Huang et al. [23-25]與劉又維[26]延續前人[19,21,22]的做法，分別對奈米薄膜、奈米管、超晶格薄膜垂直及平行平面方向的部份重建一個更完整的理論分析工具來計算其晶格熱傳導係數。

由上述文獻回顧可以知道，理論分析多針對也僅能針對簡單的結構推導出解析公式，且或多或少使用了一些非真實的假設，對於較複雜的結構設計，難以使用理論分析來求解，此時，數值工具是另一種選擇。Yang 與 Chen [27]使用離散座標法(discrete ordinate method, DOM) 研究矽包覆鍍複合材料，他們發現在奈米尺寸侷限效應下所造成的溫度分布與塊材複合材料不同，而在固定矽奈米線的尺寸下，隨著外圍鍍尺寸的縮小，介面密度提高使得等效熱傳導係數下降。Li et al.[28]也以 DOM 求解多孔性材料(方孔)的等效熱傳導係數，發現孔徑較小其熱傳導係數較高，此外他們認為在孔徑間距與孔徑比值小於 1.22 時，熱傳導係數由材料尺寸主導，大於 1.22 後，不論模擬尺寸為何，等效熱傳導係數皆隨著比值提高而增加。

近年來，求解電載子(charge carrier)波茲曼傳輸方程式的技術有大幅的進展，而使用蒙地卡羅法(Monte-Carlo, MC)求解聲子波茲曼傳輸方程式的方法亦逐漸被發展出來。由 Peterson [29]首先提出使用蒙地卡羅法模擬聲子在固體中的漂移與散射，聲子在物理空間和頻譜空間的分布首先會被離散化，聲子先以其群速進行移動後，而後依據平均自由路徑(mean free path)算出發生散射的機率。此外，在邊界的網格，在每一個時間步階(time step)內會不斷更新其內部聲子的性質以

維持固定的邊界溫度。Mazumder 和 Majumdar [30]提出散射的機率為頻率和溫度的函數，將聲子的正常(Normal)和倒逆(Umklapp)過程一起使用單一鬆弛時間來計算，而雜質散射則是另外處理。Chen et al. [31]則設計了遺傳算法(genetic algorithm)來處理聲子間的散射，讓正常過程的聲子散射維持動量和能量的守恆，而倒逆過程則只維持能量守恆，其研究結果顯示當 Si 奈米管的直徑小到 100 奈米以下時，其侷限效應(confinement effect)是不可忽視的。Jeng et al. [32]進行灰介質(gray medium)假設，並將所有不同的聲子散射機制合併成使用單一特徵鬆弛時間，用以簡化模擬；根據研究結果，他們建議對奈米複合材料(nano-composite)的熱傳導係數而言，單位體積的界面截面積為代表尺寸影響(size effect)的最重要參數。Lacroix et al. [33]以 MC 模擬矽奈米管，將邊界散射率視為頻率、極化、半徑和溫度的函數，計算因尺寸效應所減少的材料熱傳導係數，與實驗比較有相當程度的一致性。Tian 和 Yang [34,35]使用 MC 模擬，由模擬結果知道交錯堆積的矽鍺奈米線之等效熱傳導係數比鍺包覆矽奈米線的來得低；隨機排列的奈米線複合材料，在高介面密度下，增大兩不同材料的熱傳導係數比對於複合材料熱傳能力沒有顯著提升，尤其當較高熱傳導係數材料的體積比值小於臨界體積比(percolation threshold)，此現象更為明顯。Moore et al. [36]則以鋸齒狀邊界的奈米管進行模擬，並得到了比平滑邊界奈米管還低的熱傳導係數。

另外，我們注意到在電子封裝與 LED 散熱等領域，常需要考慮兩不相等截面積熱傳遞所造成的擴散/收縮熱阻，前人在特定邊界條件下曾發展出許多理論解。Kennedy [37]以分離變數法發展出軸對稱圓柱座標下的解析解，熱源為均勻熱通量，熱沉(heat sink)邊界條件限制為等溫或絕熱邊界。Lee et al. [38]發展出在軸對稱下，其熱沉邊界條件可由調整參數變化為等溫、對流與外加熱阻之邊界。Yovanovich et al. [39]得到可由異質材料合成矩形熱沉，而熱源入口位於熱沉中心的解，其熱沉邊界可為半無限長或對流邊界。Muzychka et al. [40]其解熱沉亦可由異質材料組成，且熱源可偏心位於矩形熱沉上，熱沉邊界條件為對流邊界的通解。這些理論研究已有許多結果可以應用於實務上，但均未曾考慮過尺寸效應對

擴散熱阻或者熱傳導係數等向性的影響。

1-2 研究動機與目的

由前一節的文獻回顧中可以發現，在奈米尺度下，半導體材料可藉由熱傳導係數驟降而使其熱電優值(ZT 值)上升，提高熱電系統之效率。在半導體材料中，熱能主要藉由聲子來傳遞，蒙地卡羅法為一可模擬聲子在材料中運行且計算其等效熱傳導係數的數值方法。本論文的研究目標乃利用指導教授黃美嬌老師與蔡東峻學長[41]所建立的蒙地卡羅法模擬工具，進一步研究瞭解奈米尺度下的聲子熱傳現象，主要研究重點有二：一是研究矽-鍺奈米線複合材料其邊界與異質介面對於其晶格熱傳導係數的影響，二是探討在尺寸效應下擴散熱阻的變化情形。

1-3 論文架構

本論文共分五章，以下為各章的內容概述。第一章為緒論，第二章說明蒙地卡羅法模擬工具的基礎理論及數值方法。第三章是使用該模擬工具研究矽-鍺奈米線複合材料的熱傳性質，求奈米尺度下垂直及平行軸方向之熱傳導係數，並與前人研究[42,43]相比較。第四章探討熱自一狹窄加熱線沿膜厚方向傳入矽薄膜後之熱傳擴散現象，企圖瞭解尺寸效應對擴散熱阻之影響；模擬結果並與在等向且定值之熱傳導係數條件下之理論解析解相比較。最後第五章為結論及未來展望。

第二章 基本理論與模擬方法

在本論文中，我們沿用東峻學長的蒙地卡羅法(Monte-Carlo, MC)[41]來更進一步研究奈米材料的傳輸現象。蒙地卡羅法以聲子波茲曼傳輸方程式(PBTE)為理論基礎，乃藉由追蹤並記錄聲子的運動及分布情形來求出材料的局部溫度及熱通量分布情形，再利用傅立葉定律(Fourier's law)來計算材料的等效熱傳導係數。

2-1 基本理論

2-1-1 聲子波茲曼傳輸方程式

聲子在材料中的運動及分布情形遵循著聲子波茲曼傳輸方程式(Phonon Boltzmann Transport Equation, PBTE)，其方程式表示如下：

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \bar{v}_g \cdot \nabla n = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_s \quad (2.1)$$

其中 n 為某一特定波向量之聲子的分布函數， \bar{v}_g 為其群速(group velocity)；方程式等號的左邊代表聲子在空間中的移動情形，而等號的右邊則為該聲子在移動中所發生的散射情形。由於聲子本質散射(intrinsic-scattering)的情況太過複雜，為簡化計算一般做如下之假設：

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_s = \frac{n_0 - n}{\tau} \quad (2.2)$$

其中 n_0 為聲子在局部溫度下平衡時的分布函數， τ 則為聲子之鬆弛時間；此稱為鬆弛時間近似法(relaxation time approximation)。因此聲子在 Δt 時間內發生本質散射(intrinsic-scattering)之機率(Peterson[29])可評估為：

$$P_s = 1 - \exp(-\bar{v}_g \Delta t / \Lambda) \quad (2.3)$$

其中 $\Lambda = \bar{v}_g \tau$ 即為聲子的平均自由路徑(mean free path, MFP)。

2-1-2 灰介質假設

在實際情況中，聲子的各種性質(如群速、鬆弛時間等)會隨著其波向量和極化的不同而變動。在蒙地卡羅法模擬中若要考慮聲子在極化(p)和波向量(\vec{q})的相依性，會需要極為龐大的計算量。為了節省計算時間，我們採用灰介質材料假設(gray medium approximation)：取聲子在頻率及極化下的平均性質代表該溫度下聲子的性質，因此模擬中的聲子性質僅與溫度相關。

在計算聲子的各項平均性質時需要有該材料的色散關係(dispersion relation)，而在本論文中採用實驗量測的色散關係[44]，使用如圖 2.1 所示之[100]方向的色散關係曲線，其中[100]為米勒標誌(Miller index)。

有了色散關係後，材料在各種溫度下的能量和比熱可用下面的式子來計算：

$$U = 3 \int_0^{k_B \theta_D / \hbar} \hbar \omega n_0 \cdot D(\omega) d\omega \quad (2.4)$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = 3 \int_0^{k_B \theta_D / \hbar} \frac{\partial \hbar \omega n_0}{\partial T} \cdot D(\omega) d\omega \quad (2.5)$$

其中 k_B 為波茲曼常數， \hbar 為普朗克常數除以 2π ， $D(\omega) = q^2 \partial q / 2\pi^2 \partial \omega$ 為聲子的態密度； n_0 為聲子的平衡分布函數，即 $n_0 = 1 / (\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1)$ 。接著單位體積的聲子數目(\bar{n})以及聲子的平均能量($\hbar \bar{\omega}$)與平均群速度(\bar{v}_g)分別定義如下：

$$\bar{n} = 3 \int_0^{k_B \theta_D / \hbar} n_0 D(\omega) d\omega \quad (2.6)$$

$$\hbar \bar{\omega} = U / \bar{n} \quad (2.7)$$

$$\bar{v}_g = \frac{3}{C} \int_0^{k_B \theta_D / \hbar} \frac{\partial \omega}{\partial q} \frac{\partial \hbar \omega n_0}{\partial T} \cdot D(\omega) d\omega \quad (2.8)$$

其中聲子平均群速是採用比熱做加權，而非聲子數量，以與傳統氣體動力學分析結果(式(2.9))具一致性。最後，聲子的平均自由路徑則利用塊材的熱傳導係數來計算

$$\Lambda = \frac{3k_{bulk}}{\bar{v}_g C} \quad (2.9)$$

其中 k_{bulk} 是採用實驗量測到的熱傳導係數值[2]，如圖 2.2 所示。此外，在式(2.9)中之比熱我們將只考慮聲頻聲子(acoustic phonons)的貢獻，雖然光頻聲子(optic phonons)對比熱有相當程度的貢獻，但因其聲子群速很小，對熱傳導係數的貢獻可忽略不計。

2-1-3 介面穿透模型

當聲子撞到不同材料所組成的介面時，將發生穿射(transmission)或反射(reflection)的行為，而又因為材料介面可能為光滑(specular)或粗糙(diffuse)介面而呈鏡射或亂射的反應。在此我們定義一值域在 0~1 之間的參數 P 為介面光滑係數，用來代表介面的粗糙程度，其值代表了聲子發生鏡反射或鏡穿射的機率。也就是說當 $P=0$ 代表完全粗糙的介面，反之當 $P=1$ 時為完全光滑的介面。

我們使用 Chen[22]所建議用以預測介面穿射及反射反應的非彈性聲學不協調模型(inelastic acoustic mismatch model, IAMM)來計算聲子的鏡穿透率(specular transmissivity)，其計算方法如下式：

$$\begin{cases} \tau_{12} = \frac{4Z_1 Z_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(Z_1 \cos \theta_1 + Z_2 \cos \theta_2)^2} & \text{for } 0 \leq \theta_1 < \theta_{cr} \\ \tau_{12} = 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.10)$$

其中 θ_1 為入射角，而 $Z = \rho \bar{v}_g$ 為聲學阻抗(ρ 為密度，在本論文中所採用的矽、鎳的材料密度分別為 2329、5323 kg/m³)。而穿射角 θ_2 則可由非彈性聲學不協調模型決定之：

$$\frac{\sin \theta_2}{\sin \theta_1} = \sqrt{\frac{U_1 \bar{v}_{g,1}}{U_2 \bar{v}_{g,2}}} \quad (2.11)$$

由式(2.15)可計算出全反射的臨界角 θ_{cr} ：

$$\sin \theta_{cr} = \sqrt{\frac{U_2 \bar{v}_{g,2}}{U_1 \bar{v}_{g,1}}} \quad (2.12)$$

而當聲子發生鏡反射時，只要改變 $\cos \theta_1$ 的正負號即可。

在另一方面，若聲子為亂反/穿射時其穿射率的計算方法如下

$$\tau_{12} = \frac{U_2 \bar{v}_{g,2}}{U_1 \bar{v}_{g,1} + U_2 \bar{v}_{g,2}} \quad (2.13)$$

在亂反/穿射後聲子運動方向與介面法線夾角 θ_2 將設為 $\cos \theta_2 = \pm \sqrt{r}$ ，其中 r 為 0 到 1 之間的均勻亂數，而平行介面的運動方向則隨機選擇一個角度即可。另外，在上述的計算中，所使用到跟溫度有關的參數皆採用聲子入射時所處位置的局部溫度。



2-2 蒙地卡羅法工具

本節中，我們介紹以上節所述之理論基礎與假設所建立的蒙地卡羅法模擬流程。

2-2-1 初始條件

模擬前先對欲研究的材料進行網格切割，如圖 2.3 所示為矽-鍍奈米線複合材料垂直奈米線軸方向截面示意圖，虛線表示網格；每個網格皆為單一材料，圖中不同顏色的網格代表不同的材料。將聲子均勻隨機(uniformly randomly)散布於各個網格中，聲子的各種性質可依設定之初始溫度(T_0)以式(2.7)~式(2.9)來求得。一般而言，若計算出來的聲子數目($U \mathcal{V} / \hbar \omega$ ， \mathcal{V} 為每一網格體積)很大，將導致過大的計算量，故常將一群聲子綁成聲子束，假設聲子束中的聲子行為一致，因此模擬中僅需以一顆模擬粒子代表聲子束中所有聲子的行為，進而減少計算量。令 W 代表一個聲子束中所具有的聲子數目，因此模擬中的每一顆“聲子”(此

後，我們都稱一聲子束為“一顆聲子”)所具有的能量其實為 $Wh\bar{\omega}$ 。

而聲子的位置和方向皆是均勻隨機分布，可由下式(Mazumder[30])獲得(參考圖 2.4)：

$$\text{位置： } \vec{r}_p = \vec{r}_A + r_1\vec{a} + r_2\vec{b} + r_3\vec{c} \quad (2.14)$$

$$\text{方向： } \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta\cos\psi \\ \sin\theta\sin\psi \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \cos\theta &= 2r_4 - 1 \\ \psi &= 2\pi r_5 \end{aligned} \quad (2.15)$$

其中 $r_1 \sim r_5$ 為 0~1 之間的均勻亂數。

通常網格的能量(UV)不會恰好是聲子能量($Wh\bar{\omega}$)的整數倍，模擬中必須隨時記錄因填入整數顆聲子後而多出或缺少部份的能量，於必要時加或減一顆聲子來控制其值不超過一顆聲子能量的一半，以保持每一網格內的能量守恆。

2-2-2 對稱條件

在模擬中可藉由幾何上對稱性來進一步減少計算量。如圖 2-3 為本論文第三章欲研究的材料示意圖，為一材料規則內嵌另一種材料(方形奈米線)之複合材料，若熱流方向(x)為垂直奈米線軸方向(z)，很明顯地沿著軸方向聲子分布機率應相同，因此，模擬可在二維平面(x-y)上進行即可。

2-2-3 聲子分解運算

分解運算(operator splitting)是一種簡化運算子的方法，目的在使運算子變成非耦合。模擬中令聲子在空間中先以現有的速度移動一段時間 Dt ，然後計算這段時間內聲子會發生散射的機率 P_S (式(2.3))與一個 0 到 1 之間的均勻亂數相比較，若該亂數小於 P_S 則判定該聲子會發生散射：聲子的移動方向將被重新均勻隨機設定，能量與群速的大小則更新為目前所在網格溫度下的平衡值；反之判定聲子不會發生散射。為了保持能量守恆，聲子因散射而增加或減少的能量也將被記錄下來；當某一網格其能量增減累積之值超過其半顆聲子的平衡能量時，即在

該網格中隨機加入或減少一個聲子，藉此可保持每一網格的能量守恆。

當聲子移動到任一網格邊界時，我們會判斷該邊界兩側的材料是否相同：若否，即代表該聲子撞到異質介面，需對聲子做介面散射的處理。做法如下：先產生兩個 0 到 1 之間的均勻亂數 r_1 、 r_2 ，並分別與介面光滑係數(P)及穿透率(τ_{12})相比較，當 $r_1 < P$ 時，聲子會發生鏡穿射($r_2 < \tau_{12}$)或鏡反射($r_2 > \tau_{12}$)；反之，則會發生亂穿射($r_2 < \tau_{12}$)或亂反射($r_2 > \tau_{12}$)。聲子的移動方向在撞到異質介面將會發生改變(2-1-3 節)，同時聲子的群速大小除了在鏡反射時保持不變外，其他情況下會被設定成散射後所處新網格之溫度下的平衡值。為了符合非彈性聲學不協調模型，聲子的能量無論是在鏡反/穿射或是亂反/穿射，其前後均保持不變。因此，瞬間同一網格內的所有聲子，其能量不一定都相同，以第三章矽/鍺奈米線複合材料為例，無論是在矽材料或鍺材料中，都有可能存在帶有 $Wh\bar{\omega}_{Si}$ 和 $Wh\bar{\omega}_{Ge}$ 能量的聲子。為了將之區分出來，我們在模擬中設定“能量材料屬性(energy material property)”的聲子性質，當聲子具有 $Wh\bar{\omega}_{Si}$ (或 $Wh\bar{\omega}_{Ge}$) 的能量時，則其“能量材料屬性”的性質就為矽(或鍺)。

2-2-4 邊界條件

根據欲研究材料的邊界性質，模擬中設計三種不同的邊界條件以滿足其物理意義，分別為絕熱邊界條件、週期性邊界條件及熱流控制邊界條件。

(1) 絕熱邊界條件

因為邊界為絕熱，所以不會有能量從邊界處流入或流出，因此撞到該邊界的聲子會全部做反射處理，在此我們設定邊界光滑係數(P_B)來代表撞至邊界聲子發生鏡反射的比例。至於聲子究竟是發生鏡或亂反射，以及其後續處理皆與 2-2-3 節相同。

(2) 週期性邊界條件

以數值模擬無法模擬無窮多個週期，只能以有限個週期數並以週期性邊界輔佐，來研究具有週期性的奈米結構材料。其作法描述如下：當一個聲子從一模擬邊界離開時，令性質、速度、相對位置完全相同的一顆聲子從週期邊界的另一端射入。為簡化程式邏輯，模擬中週期性邊界的兩端相對應的材料應盡量設為相同。

(3) 熱流控制邊界條件

為了得到材料熱傳導係數，我們必須從邊界處加入熱能(射入聲子)以產生熱通量或溫度梯度。在此我們設計固定熱通量和固定邊界溫度兩種方法。

(3.1) 固定熱通量

令 q_0'' 為熱流方向(x 方向)上指定的平均熱通量， $E_{\pm}(j,k)$ 為每一時步(Δt)內從邊界第 (j,k) 個網格中離開邊界的總能量，其中 + 代表入口邊界，- 代表出口邊界。由於奈米結構的存在，熱通量一般並不會均勻分布於(y-z)截面中，但分布情形又無法事先得知。在此我們設計了三種方法來決定邊界的熱通量分布，第一個方法為假設整個模擬系統離平衡狀態差異不大，因此假設邊界一時步的熱流量分布等於離開邊界的聲子總能量分布，即

$$q_{\pm}(j,k) = \frac{E_{\pm}(j,k)}{\sum_{j,k} E_{\pm}(j,k)} \cdot q_0'' A \Delta t \quad (2.16)$$

其中 A 為總截面面積。第二種方法則是直接量測模擬系統中某適當位置處截面上的熱通量分布，並令邊界處的熱通量分布與其相同。以矽/鍺奈米線平行軸方向熱傳為例(圖 2.3)，平衡時模擬系統中間任一個截面的熱通量分布皆應與邊界處的熱通量分布相同，因此我們可量取最中間截面的熱通量分布(q_{mid})來做為邊界的熱通量分布，如下式所示：

$$q_{\pm}(j,k) = \frac{q_{mid}(j,k)}{\sum_{j,k} q_{mid}(j,k)} \cdot q_0'' A \Delta t \quad (2.17)$$

由於在模擬中淨熱通量大小的數量級通常與一顆聲子的能量的數量級相當，因此瞬間的分布可能因為取樣不夠而有很大的跳動。解決的辦法是取 $q_{mid}(j,k)$ 一段時間的平均值來使用，以避免其跳動幅度太大而導致模擬不穩定。第三種方法為對流邊界條件，邊界熱通量分布設定為

$$q_{\pm}(j,k) = h(T_b - T_s) \cdot A_b(j,k) \Delta t \quad (2.18)$$

其中 h 為預設的對流熱傳係數， T_b 為邊界網格瞬時的溫度， T_s 為邊界外周圍的溫度(ambient temperature)，而 $A_b(j,k)$ 為該網格之截面積。最後，從邊界射入的總能量

應為 $E_{\pm}(j,k) \pm q_{\pm}(j,k)$ ，射入聲子數目為 $Max(0, E_{\pm}(j,k) \pm q_{\pm}(j,k)) / (W \hbar \bar{\omega}_{\pm}(j,k))$ ，其中 $W \hbar \bar{\omega}_{\pm}$ 為入射聲子的能量，此能量值容後說明。

(3.2) 固定邊界溫度

若給定邊界溫度 T_{\pm} ，則先計算在該邊界溫度下聲子的平衡能量(U)及速度(v_g)，令總入射能量為 $(U v_g A \Delta t / 4)_{\pm}$ ，此總能量即為在平衡時 Δt 時間內會輻射至截面 A 之總能量；入射聲子的數目因此為 $(U v_g A \Delta t / 4)_{\pm} / (W \hbar \bar{\omega}_{\pm})$ 。至於入射聲子的性質設計有下面兩種方法決定之。

(3.a) 擬似週期性射入法

此為 Jeng et al.[32]提出的擬似週期性邊界條件(pseudo-periodic boundary condition)聲子射入法，此方法基本上假設聲子偏離平衡值的部份(deviation)只與溫度梯度有關，與溫度無關。因此若入出口邊界溫度梯度相同(預期平衡時溫度為線性分布)，則聲子偏離平衡值的部份應相同，即具有週期性。我們進一步改

良此方法，實施步驟如下：首先在每一時步中建立一個資料槽(data pool， $Pool_{\pm}(j,k)$)，用來收集該時步內離開計算區域的聲子的位置、移動方向、殘餘位移時間及能量材料屬性。當欲從入口(出口)射入聲子時，我們隨機從出口(入口)的資料槽中選出一聲子(稱為槽聲子)，令入射聲子在截面上的位置等於槽聲子的相對位置，入射聲子的速度為邊界網格材料在邊界瞬間溫度下之平衡速度，但能量則是根據邊界瞬間的溫度與槽聲子的能量材料屬性計算獲得，最後讓該入射聲子完成殘餘時間的移動。

(3.b) 亂數射入法

我們假設邊界外處於平衡狀態，聲子無特定方向性，所以聲子以均勻隨機的方向從邊界處射入。由於在平衡狀態下通過截面之聲子數與其運動方向的餘弦值($\cos\theta$ ， θ 為聲子運動方向與截面法線的夾角)呈線性關係，所以我們可以令入射聲子的方向為 $\cos\theta = \pm\sqrt{r_1}$ 、 $y = 2pr_2$ ，殘餘位移時間為 $r_3\Delta t$ ，其中 $r_1 \sim r_3$ 為0到1之間的均勻亂數。入射聲子的能量則由邊界網格的溫度及材料屬性來計算獲得，同樣令入射聲子完成殘餘時間的移動。

2-2-5 模擬流程

圖 2.5 為蒙地卡羅法的模擬流程圖。在模擬前我們會先建立不同溫度下所對應不同聲子性質的表格，並於模擬中直接查表內插求得聲子性質，以節省計算時間。

聲子首先以瞬時的速度移動，在過程中判斷是否發生散射或撞到異質介面，若是，則做適當之對應處理。若邊界為熱流控制(heat control)邊界，則從邊界射入新的聲子以維持一定的熱通量或邊界溫度。而後根據每一個網格內瞬間的能量密度可換算出網格的瞬間溫度及在該溫度下的所有聲子性質，並於此時加入或減少聲子以滿足能量守恆。最後，再將聲子依網格位置重新排序(re-ordering)以方

便下一時步的運算，如此即完成這一時步中的所有運算(time step finished)。



第三章 矽-鍺奈米線複合材料之熱傳分析

在本章中，我們利用蒙地卡羅工具來對模擬矽-鍺奈米線複合材料的熱傳現象，並與前人研究結果來做比較。在接下來的圖表中我們將以 Si(Ge)代表矽包覆鍺奈米線之複合材料，以 Ge(Si) 代表鍺包覆矽奈米線之複合材料。

3-1 矽-鍺奈米線複合材料垂直軸方向之熱傳

此處我們在 x 方向採用固定熱通量邊界、y 方向使用週期性邊界條件來探討矽-鍺奈米線複合材料在垂直軸方向之熱傳現象，見圖 2.3。由於熱傳輸在垂直紙面方向具對稱性，故可將此問題簡化為二維問題。在底下的所有模擬，乃將內嵌奈米線尺寸固定為 $10 \times 10 \text{nm}^2$ 及 $50 \times 50 \text{nm}^2$ 兩種，改變外圍包覆材料的尺寸與兩者間界面的光滑係數，藉以研究介面密度及介面粗糙度對複合材料熱傳導係數的影響。

3-1-1 週期測試

由於邊界條件為人工添加的，模擬結果深受邊界條件影響，故需要使用多個週期模擬，以降低邊界條件的影響。網格測試的目的是要在計算量與準確性的同時考量下，選擇適當的網格來進行模擬。我們取介面光滑係數 $P=0$ ，最小模擬尺寸(鍺包覆 10nm 矽奈米線，週期為 13nm)之複合材料作為測試例，因其本質散射最少，邊界影響傳遞範圍占總體積比例最高；分別以 1×1 、 1×3 、 1×5 、 3×3 個週期進行模擬，圖 3.1 為 3×3 個週期之模擬區間示意圖，模擬參數與等效熱傳導係數見表 3.1，穩態溫度圖見圖 3.2a、圖 3.2b。模擬結果顯示 1×1 個週期與其他測試例有較大誤差，但仍有不錯結果，而 1×5 、 3×3 、 1×3 其溫度分布皆呈現很

好的周期性。各取中間週期來計算等效熱傳導係數，其相對差異都在 0.4% 以內，故對於粗糙介面，我們決定採用 1×3 個週期進行模擬。

當介面光滑係數 $P=1$ 時，由於光滑介面其介面散射較弱，邊界的影響會傳遞更遠，故預期需更大的模擬空間。我們仍以鍍包覆 10nm 矽奈米線之複合材料為測試例，取 1×5 與 1×3 個週期來測試，模擬參數與等效熱傳導係數見表 3.2，穩態溫度分布見圖 3.3。圖 3.3 顯示所設計的邊界條件相當稱職，模擬所得的溫度分布都顯現出很好的周期性，而計算所得的等效熱傳導係數相對誤差在 2% 內，故仍可以 1×3 個週期進行模擬。另一方面，在矽包覆鍍奈米線複合材料的模擬中，由於受到聲子方向依賴性的影響[45]，邊界影響加劇，因此模擬週期數目需要適當地個案調整，直到數據收斂為止。

3-1-2 溫度及熱通量分布

此小節以鍍內嵌 $L_1=10\text{nm}$ 之矽奈米線、週期 L_2 為 20nm 、 $P=0$ 之複合材料為例，探討穩態後經時間平均之溫度分布。圖 3.4 顯示由於介面熱阻使得聲子傳輸受到阻礙，而在奈米線左邊形成高溫區(能量聚集區)，右邊則相對形成低溫區。取圖 3.4 之 a、b、c 截面上的熱通量分布繪於圖 3.5，在 a、b 截面上熱通量與邊界上(d 及 e)熱通量分布相當一致，符合週期性要求，而截面中間因介面熱阻影響使得熱通量較低。

3-1-3 等效熱傳導係數

令材料初始溫度為 330K ，且因為熱傳導係數為溫度的函數，為了避免模擬區間內溫差過大影響模擬結果，我們刻意調整平均熱通量 q ，控制所有的模擬區域出入口平均溫差都在 50 度左右。當系統達穩態時，取中間週期左右兩側平均溫度之差 ΔT ，仿效 Fourier's law 定義等效熱傳導係數為 $qL_2/\Delta T$ 。

3-1-3a 粗糙介面

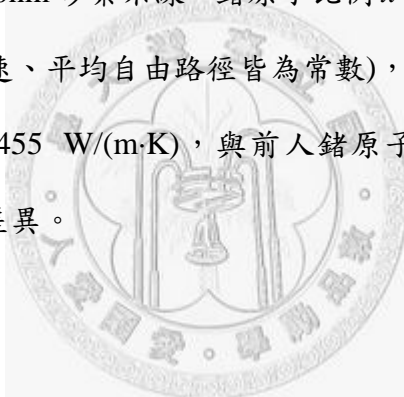
此小節討論介面光滑係數 $P=0$ (完全粗糙介面)，在相同矽鍺材料體積比下，比較矽包覆鍺或以鍺包覆矽之複合材料內熱傳之異同，模擬參數如表 3.3a、表 3.3b 所示，模擬結果見圖 3.6。由圖 3.6 可看出，不論是矽包覆鍺還是鍺包覆矽，隨著外圍材料增厚，介面密度降低，等效熱傳導係數隨著提高，此與塊材觀點有很大的不同。從塊材觀點來看，在鍺包覆矽時，固定內嵌矽(高熱傳導係數材料)的尺寸，增加外圍鍺(低熱傳導係數材料)的尺寸，應使得複合材料熱傳能力下降。若不考慮介面熱阻的影響，並將問題簡化為一維熱傳導問題，即將複合材料視為三個熱阻的串聯、中間熱阻為三個熱阻的並聯，如圖 3.7 插圖所示，其中

$$R_1 + R_3 = (L_2 - L_1) / (k_a L_2 \cdot \text{depth}) \quad , \quad R_{21} = R_{23} = 2L_1 / (k_a (L_2 - L_1) \cdot \text{depth}) \quad ,$$

$$R_{22} = 1 / (k_b \cdot \text{depth}) \quad ,$$

a 為包覆材料， b 為內嵌材料。則等效熱傳導係數應如圖 3.7 所示：矽體積比越大，複合材料等效熱傳導係數就越大。然而，實際上在奈米尺度下，由於本質散射微弱，而粗糙介面影響強烈，對於鍺包覆矽複合材料而言，雖然增加外圍鍺的體積會降低本質熱傳能力，但介面密度會下降，介面散射率隨之下降，因而大大降低介面熱阻；兩者較量之下，等效熱傳導係數還是隨著鍺的體積占有率增加而增加。此外，在相同介面密度下，從塊材觀點來看，存在有一個臨界體積比 0.473：大於此臨界點，矽包覆鍺複合材料的等效熱傳導係數高於鍺包覆矽，小於則反之。但模擬結果顯示無論體積比是多少，矽包覆鍺複合材料的等效熱傳導係數皆大於鍺包覆矽(見圖 3.6)。此現象歸因於在矽包覆鍺複合材料中，熱可以在較高熱傳導係數的矽材中找到連續路徑傳遞熱量，而在鍺包覆矽複合材料中，矽材卻是離散分布的；當介面密度高時，這個因素影響力相對減弱，因此兩種材料的等效熱傳導係數差異逐漸變小。最後，當尺寸變小，聲子幾乎不受本質散射，但介面散射率提高，故在相同體積比下，10nm 奈米線複合材料之熱傳導係數比 50nm 奈米線複合材料來得小。

圖 3.8 為 Yang and Chen[27]的 DOM(discrete ordinate method)計算結果與 Jeng et al.[32]蒙地卡羅法模擬結果和此節蒙地卡羅法模擬結果的比較，其中橫軸 x 值表示鍺材料占整體計算材料的原子比例(此處所用矽的晶格常數為 5.431\AA ，鍺為 5.658\AA)。如前所述，所有模擬皆顯示在固定矽奈米線的尺寸下，隨著外圍鍺尺寸的縮小，介面密度提高，使得等效熱傳導係數下降。而本研究之蒙地卡羅法模擬所得到的等效熱傳導係數都較前人的結果大，其原因主要為本研究所使用的聲子性質表與前人不同，所使用之塊材熱傳導係數也較高，其次我們控制熱通量讓模擬區域總溫差約在 50 度左右，且聲子性質隨著溫度不同而不同；而 DOM 的研究中只有 1 度的溫差，並以室溫下的聲子性質來做計算。為了驗證差異來自材料性質之不同，我們以 10nm 矽奈米線、鍺原子比例 $x=0.808$ 重做測試，採用前人的材料性質(比熱、群速、平均自由路徑皆為常數)，但仍控制 40 度溫差重新模擬。所得結果為 $k=8.455\text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ，與前人鍺原子比例 $x=0.82$ 下之 $k=8.2\text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ，僅有約 3% 的差異。



3-1-3b 光滑介面

在前一節的討論中我們已知道粗糙介面影響熱傳甚劇，但光滑介面其熱阻不像粗糙介面那麼大，複合材料之等效熱傳導係數或許有不一樣的變化趨勢。圖 3.9 顯示矽包覆鍺奈米線複合材料(模擬參數如表 3.4 所示)模擬結果。如同圖 3.6 所示，其等效熱傳導係數隨著矽體積比的增加而增大，因為一方面增加高熱傳導力材料(矽)所佔比例，一方面又降低介面密度。相反地，若以鍺包覆矽(模擬參數如表 3.5 所示)，圖 3.10 顯示在增加低熱傳導能力材料(鍺)體積比與降低介面密度效應的抗衡下，鍺包覆矽奈米線複合材料之等效熱傳導係數出現有一最小值，當奈米線尺寸為 10nm 時，此臨界體積比為 0.61，50nm 時則為 0.75。

3-2 矽-鍺奈米線複合材料平行軸方向之三維熱傳

此節中我們將探討鍺包覆矽奈米線複合材料平行軸方向之熱傳現象，圖 3.11 為示意圖，其中矽鍺介面皆設為粗糙介面(介面光滑係數 $P=0$)。垂直熱傳方向(x 及 y)邊界分別選用絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B=0$)與週期性邊界兩種進行研究，前者代表一矽奈米線被包覆在另一鍺奈米線內，後者則代表很多矽奈米線規則排列地被包覆在鍺材料內。固定內嵌矽材料尺寸為 $L_1=10$ 及 50nm 時，改變外圍鍺材料尺寸 L_2 ，探究複合材料其熱傳能力的變化。

3-2-1 平行處理

由於軸向熱傳是屬於三維現象，須進行三維模擬，整體計算量相當龐大，因此我們在模擬工具中加入平行計算的功能，以減少計算所需的真實時間。

在此感謝陳立杰學長在程式中加入平行計算功能，平行程式的設計邏輯為空間切割法，簡述如下。首先依照所使用的處理器數量，將計算區域分成若干子區域給各處理器，每一時步每一處理器先進行其內部聲子的時間積分(位移及本質散射)；接著，與其相鄰子區域進行聲子資料交互，整理出移動後仍位於或新進入該處理器子區域中之聲子，然後即可進行下一時步的運算。

3-2-2 模擬區間測試

在模擬方法方面，在此我們做了一個新的測試：將綁多個聲子為聲子束的方法由原本矽、鍺皆以相同聲子數目綁成聲子束，改為令矽、鍺的聲子束帶有相同的能量，這將使得每一矽或鍺的聲子束所擁有的聲子數目並不相同。新的做法是為了降低每個矽、鍺聲子束所帶有的能量差異，藉此降低介面穿透時引起的能量跳動。

針對絕熱邊界(雙層奈米管)，我們以 $L_1=10$ 、 $L_2=15\text{nm}$ 來做區間測試，固定每一網格大小為 $2.5\times 2.5\times 2.5\text{nm}^3$ ，分別以 $24\times 12\times 12$ 、 $40\times 12\times 12$ 、 $60\times 12\times 12$ 、

80×12×12個網格來進行模擬，取適當模擬區域、利用最小方差法來計算穩態時之溫度梯度，再利用 Fourier's law 求得等效熱傳導係數，所得結果見表 3.6，其最大相對誤差在 0.5%內，可知由於外層奈米管的邊界散射與內外兩層間的介面散射相當強烈，造成熱擴散順利，邊界影響微弱，因此並不需要太長的模擬區間即可得到很好的模擬結果。

當邊界條件改為週期性邊界時(鍍包覆矽奈米線)，由於少了邊界散射，熱擴散必較弱，預期邊界條件的影響會較前者為大，我們以 24×12×12 及 60×12×12 兩種網格進行測試，結果列於表 3.7。其中 24 與 60 個網格數所得等效熱傳導係數分別為 7.92 與 7.86 W/(m·K)，差異甚小。故以下模擬，不管是週期性邊界或絕熱邊界我們選用至少 24×12×12 的網格數。

3-2-3 溫度及熱通量分布

我們以 $L_1=10$ 、 $L_2=25\text{nm}$ 為例，選用網格大小為 $2.5\times 1.25\times 1.25\text{nm}^3$ ，網格數為 $40\times 20\times 20$ ，圖 3.12 所示分別為絕熱邊界與週期性邊界其中間截面之熱通量分布。如圖 3.12 左圖所示，由於粗糙絕熱邊界與矽鍍介面處熱阻較大，使得在邊界、介面處附近熱通量較低；截面中間內嵌矽材料導熱性較佳，故有較大的熱通量。圖 3.12 右圖為週期性邊界的熱通量分布，雖然外圍鍍材料其本質熱傳能力較內嵌矽材料低，但由於聲子傳遞的截面積較大，熱阻反而較小，比受到介面熱阻影響的內嵌矽材料，擁有較大的熱通量。圖 3.13 為穩態下，熱傳方向長度無因次化 $Z^*=0.0125$ 及 0.5、0.9875 在平均 x 方向溫度後所得的溫度分布，當中每一截面下的溫差都在 1 度內，也就是說在 x、y 方向溫度可視為均勻分布。圖 3.14 為沿熱傳方向截面平均溫度分布圖，可看出沿著熱傳方向溫度呈現良好的線性分布。

3-2-4 等效熱傳導係數

令材料初始溫度為 330K，為了避免過大的溫差影響模擬結果，我們調整熱通量控制模擬區域出入口平均溫差在 50 度左右。接下來我們取適當長度(即取足夠顯示其熱傳效應，但又不受邊界影響之長度)以最小方差法求出溫度梯度，再利用 Fourier's law 計算其等效熱傳導係數。

3-2-4a 絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$)

此小節討論鍺包覆矽雙層奈米線複合材料，垂直熱傳方向的邊界為絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$)，固定內嵌矽材料 $L_1 = 10\text{nm}$ 與 50nm ，改變外圍鍺材料 L_2 尺寸，觀察其等效熱傳導係數的變化，模擬參數列於表 3.8a、3.8b。Yang and Chen[42] 以 DOM(discret ordinate method)解圓柱座標聲子波茲曼方程式，計算模型見圖 3.15，我們將此處模擬結果與他們的鍺包覆矽奈米線($r_0 = 0$ 、 $p_2 = 0$)之計算結果相比較，並令 $2r_1 = L_1$ ， $2r_2 = L_2$ 。圖 3.16 顯示在相同 $(L_2 - L_1)/L_1$ 下，內嵌矽材料尺寸 L_1 較大者，其等效傳導係數也較大，這是由於當 L_1 越大，邊界與介面熱阻影響越小，致使等效熱傳導係數越高。在較小 $(L_2 - L_1)/L_1$ 時，複合材料其等效熱傳導係數隨著外圍鍺材料尺寸增大而下降，此與塊材趨勢相同；不過當 $(L_2 - L_1)/L_1$ 大到一定程度後，隨著 $(L_2 - L_1)/L_1$ 越大，等效熱傳導係數卻越大。一個合理的詮釋是當 $(L_2 - L_1)/L_1$ 由小略微增大時，介面熱阻變化不大，但鍺截面積變大，吸引較多聲子選擇鍺材料傳遞，因此等效熱傳導係數減小；當 $(L_2 - L_1)/L_1$ 大到一定程度時，介面密度或介面散射開始明顯減弱，因此等效熱傳導係數也開始增加。至於與 Yang and Chen[42] 計算結果的差異，主要仍歸因於所用聲子性質表不同，此差異在 3-1-3a 節已討論並驗證過。

3-2-4b 週期性邊界

此處延續上節，討論鍺包覆矽奈米線複合材料，但垂直熱傳方向的邊界改為週期性邊界，一樣固定內嵌矽材料 $L_1 = 10\text{nm}$ 與 50nm ，改變外圍鍺材料 L_2 尺寸，

觀察其等效熱傳導係數的變化；模擬參數見表 3.9。Yang and Chen [43] 其計算模型如圖 3.17，其中他們是以同心圓截面來近似週期性的鍺材料內嵌矽奈米管，並將垂直熱傳方向邊界光滑係數設為 $P_B=1$ ，即聲子在撞至邊界後，其反應為鏡反射。絕熱且完美光滑邊界條件與周期性邊界條件雖物理性質並不相同，但統計上認為有異曲同工之妙，我們以 $L_1=10$ 、 $L_2=15\text{nm}$ 及 $L_1=10$ 、 $L_2=20\text{nm}$ 兩個測試例進行測試，所得到的等效熱傳導係數分別為 7.92 與 7.87 W/(m·K) 及 12.09 與 12.13 W/(m·K)，差異確實甚小。圖 3.18 為模擬結果及比較，其中 ϕ_{Si} 表示矽材料佔整體材料體積之百分比。與前一小節研究結果雷同，在相同矽材料體積比之下，內嵌矽材尺寸越大其等效熱傳導係數越大，而隨著矽材料體積比越大，即外圍鍺材料尺寸越小，介面熱阻影響越大，使得等效熱傳導係數越小。



第四章 尺寸效應對擴散熱阻之影響

此章我們先模擬塊材尺寸下(即材料特徵長度與聲子的平均自由路徑相當,後者在 300K 下約 200nm)之矽薄膜材料內熱擴散現象,模擬結果與等向且固定熱傳導係數下之二維穩態熱擴散方程式的理論解相比較,從中驗證程式的準確性及薄膜材料熱傳導係數溫度相依性的影響;接著比較塊材與奈米材料模擬解之異同,特別探討尺寸效應對擴散熱阻的影響。模擬模型見圖 4.1,一加熱線置於薄膜中央處,提供固定均勻的加熱率,薄膜另一面以固定溫度之冷空氣冷卻之,對流熱傳導係數固定為 $h=0.1\text{meV}/(\text{ps}\cdot\text{nm}^2\cdot\text{K})$ 。模擬中聲子自入口處(加熱線處)以亂數射入法均勻射入材料內,進行位移及本質散射;假設頂面及左側面(加熱線處除外)為絕熱邊界條件,且為了使尺寸效應成為除了膜厚外的唯一獨立變因,邊界設定為完美光滑的表面(邊界光滑係數 $P_B=1$),即不考慮邊界粗糙度的影響。而右側面熱對流條件中自由流溫度固定為 $T_a=300\text{K}$,瞬間熱通量控制為 $h(T_b-T_a)$,其中 T_b 為最靠近右邊界的網格溫度。

4-1 塊材尺寸模擬與理論解

此處我們先求二維穩態熱擴散方程式解析解,假設材料的熱傳導係數與邊界對流熱傳係數皆為定值,即其值不隨溫度而改變。為與此理論解相比較,我們進行兩種模擬,其一材料的熱傳導係數是隨溫度而改變的,模擬乃依據實驗量測數據所建立的聲子性質表來進行;其二模擬採用聲子比熱、群速、平均自由路徑皆保持常數之材料性質進行模擬,也就是模擬和理論解相同,材料的熱傳導係數為一定值。後者與理論解的比較可用來驗證模擬程式的準確性,前者則將指出熱傳導係數的溫度相依性對熱傳之影響。

4-1-1 塊材理論解析解

考慮一個二維穩態熱傳問題如圖 4.1 所示[48]，其中 a 為加熱線半寬(m)， b 為材料半寬(m)， t 為材料厚度(m)， q 為加熱熱通量(W/m^2)。在連續體、等向塊材(熱傳導係數 k_{bulk})下穩態熱擴散統御方程式與邊界條件可描述如下：

統御方程式：

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (4.1)$$

邊界條件：

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0, |y-b| > a} = 0 \quad (4.2a)$$

$$-k_{bulk} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0, |y-b| \leq a} = q \quad (4.2b)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 \quad (4.3)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=2b} = 0 \quad (4.4)$$

$$-k_{bulk} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=t, y} = h \cdot (T(t, y) - T_a) \quad (4.5)$$

此外，由於能量守恆，由左側邊界傳入的總能量應等於右側邊界離開的總能量

$$qa = hb \cdot (T_{avg}(x=t) - T_a) \quad (4.6)$$

其中 $T_{avg}(x)$ 為 x 截面之平均溫度。

上述穩態熱傳導問題可利用分離變數法解得無窮級數形式的解析解如下：

$$\left(\frac{hb}{qa} \right) \cdot (T(x', y') - T_a) = (1 + Bi \cdot x') + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ Bi \cdot \left(\frac{\cosh(n\pi x')}{\cosh(n\pi \eta)} \right) \left[\frac{n\pi + Bi \cdot \tanh(n\pi x')}{n\pi \cdot \tanh(n\pi x') + Bi} \right] \cdot \frac{1}{n^2 \pi^2 \varepsilon} \sin(n\pi \varepsilon) \cos(n\pi y') \right\} \quad (4.7)$$

其中 $x' \equiv (t-x)/b$ 、 $y' \equiv (y-b)/b$ 、加熱線寬 $\varepsilon \equiv a/b$ 、材料厚度 $\eta \equiv t/b$ 、 $Bi \equiv hb/k_{bulk}$

為 Biot number。若定義總熱阻為 $R_{avg} = (T_{avg,a} - T_a) / 2qaL$ ，其中 $T_{avg,a}$ 為加熱線處平

均溫度， L 為垂直紙面材料深度。將式(4.7)代入可得材料之總熱阻為

$$2k_{bulk}L \cdot R_{avg} = \left(\frac{1}{Bi} + \eta \right) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{n\pi + Bi \cdot \tanh(n\pi\eta)}{n\pi \cdot \tanh(n\pi\eta) + Bi} \cdot \frac{1}{n^3 \pi^3 \varepsilon^2} \sin^2(n\pi\varepsilon) \right\} \quad (4.8)$$

我們可進一步將熱阻分成一維項與擴散項來討論：

$$R_{avg} = R_{1d} + R_{spr} \quad (4.9)$$

一維項(R_{1d})表示若圖 4.1 所示之熱傳導問題由左至右可假設為一維熱傳，由膜厚及熱對流邊界所引起的熱阻值：

$$2k_{bulk}L \cdot R_{1d} = \frac{1}{Bi} + \frac{t}{b} \quad (4.10)$$

至於擴散項則起因於熱由狹窄入口處進入寬闊材料內，其往垂直方向上下擴散導致熱傳路徑增長所造成的熱阻，為：

$$2k_{bulk}L \cdot R_{spr} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{n\pi + Bi \cdot \tanh(n\pi\eta)}{n\pi \cdot \tanh(n\pi\eta) + Bi} \cdot \frac{1}{n^3 \pi^3 \varepsilon^2} \sin^2(n\pi\varepsilon) \right\} \quad (4.11)$$

由於解析解包含無窮級數，但在數值運算時不可能計算至無窮多項，我們以 $2a=2\mu\text{m}$ ， $2b=50\mu\text{m}$ ， $t=10\mu\text{m}$ ，熱通量 $q=50 \text{ meV}/(\text{ps} \cdot \text{nm}^2)$ 的例子來進行收斂測試，以找出能夠提供足夠準確度的計算項數。以累加到 $n=10^7$ 項為基準，圖 4.2 上圖為累加至 n 項所得的 $(hb/qa) \cdot (T_{avg,a} - T_a)$ ，可看出約在 1000 項後結果已收斂良好；圖 4.2 下圖為相對誤差，在展開至 10000 項時相對誤差已達到 10^{-7} ，準確性已足夠，故本論文中溫度計算皆展開至 10000 項。在下面的討論中，我們將計算每一網格中心位置處之理論解值，將之與模擬結果進行比較。

4-1-2 固定熱傳導係數模擬結果

為了與等向且固定熱傳導係數下之理論解相比較，此處使用固定聲子比熱、群速、平均自由路徑及塊材熱傳導係數(所有聲子性質皆不為溫度的函數)之聲子性質表，對於 $2a=2\mu\text{m}$ 、 $2b=50\mu\text{m}$ 、 $t=10\mu\text{m}$ 之薄膜，使用 20×100 與 40×200 兩種解析度網格進行模擬，模擬參數見表 4.1。以每個網格模擬與解析解的絕對差

值 ΔT 做圖，見圖 4.3，由圖 4.3 可看出，誤差在入口處附近最大，因此處為奇異點；離入口處愈遠，誤差愈小。將模擬結果與解析解之最高溫、最低溫及擴散熱阻佔整體熱阻之比例列於表 4.2，標示 S 為模擬結果，標示 T 則為理論解。表 4.2 顯示在提高解析度後，模擬結果與解析解之差異大幅改善；值得一提的是由於熱擴散方程式具有無窮大的擴散速度，而蒙地卡羅模擬中聲子傳遞的速度是有限的，因此兩者之間必存在著某種程度上的差異。無論如何，此模擬大致可確認本論文所採用的蒙地卡羅法之準確性。

此外，在 x 、 y 方向網格都加倍後，所需計算時間約為加密前的 4 倍，而擴散熱阻所佔比例與加密前的相對誤差僅約為 5.4%。在計算量與準確性的同時考量下，我們選擇加密前的 $\Delta x=\Delta y=0.5\text{nm}$ 網格大小做為後續所有模擬之解析度，隨著膜厚增加，膜厚方向網格數也增加；模擬等比例縮小的奈米尺度材料時亦以等比例縮小的網格尺寸來進行模擬。

4-1-3 溫度相依熱傳導係數模擬結果

此小節考慮熱傳導係數之溫度相依性，首先使用實驗量測所得聲子性質表來模擬得到矽薄膜本身之等效熱傳導係數(k_{bulk})，將此熱傳導係數帶入式(4.8)所得之結果即為理論解析解。而後，將考慮熱傳導係數之溫度相依性的模擬結果與此理論解進行比較。

因為材料內溫度並非均勻，而熱傳導係數又為溫度之函數，為了計算薄膜本身之等效熱傳導係數，我們分別模擬 $2b=50\mu\text{m}$ 、 500nm 薄膜，如圖 4.4，初始溫度為 350K，上下邊界條件為光滑絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B=1$)，熱傳方向為週期性邊界，採固定熱通量，以中間截面熱通量分布作為邊界熱通量分布，模擬參數見表 4.3。取適當長度以最小方差法得到其溫度梯度，得到 $2b=50\mu\text{m}$ 、 500nm 矽薄膜等效熱傳導係數分別為 133.972 及 134.537 W/(m·K)，其值差異甚小，因

此在接下來的計算中，我們取 k_{bulk} 等於兩者的平均值(134.2545 W/(m·K))。

接著我們仍採用表 4.1 的模擬參數模擬 $2a=2\mu\text{m}$ 、 $2b=50\mu\text{m}$ 、 $t=10\mu\text{m}$ 之矽薄膜，將聲子性質具溫度相依性之模擬結果與解析解之最高溫、最低溫及擴散熱阻佔整體熱阻之比例亦比較列於表 4.2 中。模擬總熱阻的計算方式為：加熱線處網格的平均溫度與環境溫度 300K 的差值除以所施予的總熱流量($2qaL$)；模擬所得的總熱阻與式(4.10)算出之一維熱阻的差值即定義為模擬的擴散熱阻。圖 4.5 為無因次溫度場 $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ 比較圖，圖中顯示當尺寸大時，聲子本質散射主宰熱傳，故溫度分布情形類似於線熱源往外輻射擴散。雖然模擬結果與解析解無因次化溫度分布大致吻合，但其實絕對溫差卻有數十度之譜(見表 4.2)。圖 4.6 顯示每個網格模擬與解析解的絕對差值 ΔT ，在入口處差異明顯大於圖 4.3，這是由於模擬考慮熱傳導係數為溫度的函數，而入口處溫度梯度最大；另外，網格加密後，奇異點的高溫更明顯，使得材料內部溫差範圍愈大，模擬結果與理論解差異也就更大。

4-2 尺寸效應

此節我們討論尺寸效應對擴散熱阻的影響。

4-2-1 溫度與熱通量分布

為測試尺寸效應的影響，我們選擇兩組尺寸相差一百倍之材料進行對照組實驗： $2a \times 2b = 2\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$ 及 $20\text{nm} \times 500\text{nm}$ 。在固定 $2a$ 及 $2b$ 下，改變薄膜厚度 t ，求擴散熱阻佔總熱阻比例隨膜厚增加之變化情形，模擬參數見表 4.4。圖 4.7 為膜厚 $10\mu\text{m}$ 與 100nm 鄰近入口邊界、對流邊界的熱通量分布模擬結果。由於加熱線相對於材料寬度 $2b$ 甚小，故兩測試例於鄰近左邊界處($x/t=0.05$)熱通量皆集中於中央處；當熱逐漸擴散/傳遞至上下方時，峰值逐漸降低，在對流邊界處明

顯看到奈米材料分布較塊材均勻甚多。同樣的情況也可以在鄰近出口處的溫度分布中發現，見圖 4.8。這顯示奈米材料往上下擴散的趨勢較強，表示擴散熱阻相對地應該較高。

圖 4.9 從(a)到(e)為膜厚逐漸增加時無因次溫度等高線圖(達穩態後取時間平均)，紅色線條代表塊材、藍色線條代表奈米材料。圖中顯示隨著膜厚的增加，熱更有時間從中央處擴散至上下方，使得不論塊材或奈米材料在靠近右側面的區域其溫度分布更為均勻。此外，奈米材料的溫度(熱能)等高線均較塊材水平，且更集中於加熱線高度處($y/2b=1/2$)，這是因為在奈米尺寸下本質散射稀少，較多聲子由入口處射入後可直接抵達出口而不曾被散射過，似乎也因此建立起較明顯的 y 方向的溫度梯度。

4-2-2 擴散熱阻、熱對流熱阻與厚度熱阻之比例關係

本節分析比較理論解、塊材與奈米尺寸下其擴散熱阻、熱對流熱阻與厚度熱阻佔總熱阻之比例，我們以 $2a=2\mu\text{m}$ 、 $2b=50\mu\text{m}$ 、 $t=10\mu\text{m}$ 薄膜為例，以 $k_{\text{bulk}}=134.25\text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ 計算解析解的厚度熱阻、熱對流熱阻(式 4.10)、及擴散熱阻(式 4.11)，與模擬解暨奈米材料($2a=20\text{nm}$ 、 $2b=500\text{nm}$ 、 $t=100\text{nm}$)的模擬結果相比較，比較結果列於表 4.5。表 4.5 中，解析解與塊材的差異主要來自考慮或不考慮熱傳導係數的溫度相依性的影響，而塊材與奈米材料的差異則來自尺寸效應。表 4.5 清楚顯示溫度效應引起的差異不大，相對的尺寸效應使擴散熱阻增加四倍有餘。

圖 4.10 顯示擴散熱阻佔總熱阻比例隨膜厚變化情形。塊材的模擬結果與解析解差異在 6% 內，奈米尺寸下擴散熱阻所佔比例卻遠低於塊材，這是因為對流熱阻隨尺寸(接觸面積)倍減而倍增，使得總熱阻大增所致。為合理量化尺寸效應對擴散熱阻的影響，我們再計算擴散熱阻佔總熱阻扣掉熱對流熱阻後(即膜厚熱阻與擴散熱阻之和，暫稱為膜本質熱阻， R_{film})的比例，見圖 4.11。從圖 4.11 顯示奈米材料的擴散熱阻比例確實比塊材高；若進一步定義等效熱傳導係數為

$k_{eff} = t/2bLR_{film}$ ，在擴散熱阻的影響下，等效熱傳導係數皆大大降低(見表 4.5)，奈米材料尤其是如此。另一方面，隨著膜厚的增加，雖然增加熱往上下擴散的時間，擴散熱阻逐漸增加至飽和(受限於絕熱邊界)，但厚度熱阻(源於本質散射)相對也隨膜厚增加而更快速增高，使得不管是解析解或塊材或奈米材料，其擴散熱阻所佔比例乃隨膜厚增加而降低；奈米材料因尺寸小，本質散射仍然微弱，故下降趨勢較緩和。





第五章 結論與未來展望

本論文延續開發指導教授黃美嬌老師與蔡東峻學長[41]所建立的蒙地卡羅法模擬工具，並在陳立杰學長協助下加入平行處理的功能。此模擬工具採用灰介質假設，利用實驗量測之色散關係及塊材熱傳導係數計算聲子平均性質，配合適當的邊界散射及介面穿透模型來模擬聲子的傳輸行為。本論文主要研究重點有兩項：一是探討奈米尺度下矽-鍺奈米線複合材料之熱傳性質，二是研究尺寸效應對擴散熱阻之影響。兩者之重要研究結論分述於 5-1 及 5-2 節。5-3 節則提出模擬工具可改進之處及建議未來奈米結構設計的方向。

5-1 結論 — 矽-鍺奈米線複合材料

我們將矽-鍺奈米線複合材料的所有模擬與蔡東峻學長[41]的超晶格薄膜模擬所得材料等效熱傳導係數隨介面密度(單位體積之介面面積)的變化全部繪於圖 5.1。並做出以下結論：

- (1) 原則上介面密度愈高、導熱性較差之材料體積比愈高則複合材料等效熱傳導係數愈小。
- (2) 以導熱性較差之材料作為連續熱傳主體，導熱性較佳之材料作為內嵌奈米線，可得到較低的等效熱傳導係數複合材料。
- (3) 大致上來說當異質介面為完全粗糙時，介面密度主宰複合材料的熱傳能力，熱傳導係數隨著介面密度提高而下降。當介面為完美光滑時，介面密度影響較小，熱傳導係數下降的趨勢明顯緩和甚多。
- (4) 在介面密度及材料熱傳性質差異的雙重影響下，有時會出現一臨界材料體積比，在此體積比下複合材料之等效熱傳導係數達到最小的目的，如具完

美光滑介面之鍺包覆矽奈米線複合材料垂直軸方向之熱傳及具粗糙介面鍺包覆矽雙層奈米線之軸向熱傳。

5-2 結論 — 尺寸效應對擴散熱阻之影響

- (1) 當材料中溫度梯度甚大時，熱傳導係數的溫度相依性不容忽略。
- (2) 在奈米尺度下，由於接觸面積減少、出口處熱對流熱阻大增，使得總熱阻亦大增，成為奈米尺度下熱阻的最主要來源。
- (3) 因奈米矽材內本質散射率較低，聲子可順利從入口處向各方向傳遞，因此在相同長寬比下，奈米矽材之擴散熱阻佔膜熱阻之比例高於塊材矽，在本論文研究的所有奈米樣品中，擴散熱阻皆佔膜熱阻九成以上。
- (4) 擴散熱阻隨膜厚增加而增加，本質散射造成的膜厚熱阻亦然，後者增加的速度更快，因此擴散熱阻佔膜熱阻之比例而膜厚增加而減少，其中奈米材料減少的趨勢較塊材緩和。

5-3 未來展望

- (1) 目前所有的模擬皆是採用均勻網格系統，然而在較複雜的材料內部結構區域常需要較密的網格才能完整呈現此區域複雜的熱傳現象，若整個模擬區域都使用均勻密度之網格則會使整體計算量過大，因此未來可建立一個能採用局部加密的非均勻網格或不規則網格來執行模擬。
- (2) 截至目前為止，所研究的複合材料皆只含有兩種材料，未來亦可利用此模擬工具，研究三種或三種以上異質材料所組成之複合材料。
- (3) 截至目前為止，所研究的奈米結構都是較簡易、實驗室現有的。未來可就需求設計特殊奈米結構，如塊材中滲入奈米粒子的結構、超晶格奈米管結構及其他，並尋求設計最佳化。

圖 5.2 是一範例，我們刻意於矽/鍺超晶格薄膜中加入同相或反相的 T 型結構，一方面可增加介面密度，另一方面也希望利用它來“關住”聲子，以達到降低熱傳導係數之目的。圖 5.3 為初步測試結果，異質介面為完全粗糙，採用週期性邊界，模擬 2×1 個週期，矽鍺體積比為 1:1，模擬參數見表 5.1。圖 5.3 為同相與反相 T 型結構穩態後之時間平均溫度分布，觀察到仍然是垂直熱傳方向之介面較能有效阻擋聲子傳遞，在介面前形成局部高溫；平行熱傳方向之介面處，溫度幾乎是連續的。圖 5.4 為 x 方向四個截面之熱通量分布，對於同相 T 型結構而言，截面 a、d (參考圖 5.3) 無介面處為矽材，而截面 b、c 無介面處為鍺材，無論那一截面，在無介面處皆有較大的熱流量，而無介面處為矽材時更明顯。至於反相 T 型結構結果亦然，但截面 a、b 與截面 d、c 具對稱性，因此熱通量分布吻合。取同相與反相 T 型結構中間一個週期的溫差來計算等效熱傳導係數，所得結果分別為 13.29 與 13.50 W/(m·K)。若忽略 T 型結構，將材料視為膜厚皆為 70nm 之 Si/Ge 超晶格薄膜，則對應之熱傳導係數約為 20 W/(m·K) [41]。未加入 T 型結構時介面密度約為 0.0143/nm，加入 T 型結構後增加 300% (介面密度約 0.0429/nm)，見圖 5.5，顯示 T 型結構可增加介面散射，阻礙聲子傳遞，有效降低複合材料之導熱性。另外，同相與反相 T 型結構其等效熱傳導係數差異僅在 2% 內，差異不大。

上述研究僅對加入 T 型結構之矽/鍺超晶格薄膜進行初步的探討，未來可針對不同矽、鍺薄膜厚度 ($L_3/L_4 \neq 1$) 以及改變 T 型結構尺寸 (e/g 、 e/f 、 f/g) 進行完整的參數探討，尋求最佳化設計。

參考文獻

- [1] S. Wisniewski, B. Staniszewski, and R. Szymanik, 1976, Thermodynamics of Nonequilibrium Processes, *PWN-Polish Scientific Publishers*.
- [2] C.J. Glassbrenner and G. A. Slack, 1964, Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point, *Physical Review*, 134, A1058.
- [3] M. G. Holland, 1963, Analysis of Lattice Thermal Conductivity, *Physical Review*, 132, 2461.
- [4] M. G. Holland, 1963, Phonon Scattering in Semiconductor Form Thermal Conductivity Studies, *Physical Review*, 134, A471.
- [5] G.S. Nolas et al., 1998, The Next Generation of Thermoelectric Materials, in 17th International Conference on Thermoelectrics, *Nagoya, Japan: IEEE*.
- [6] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, and B. O'Quinn, 2001, Thin-Film Thermoelectric Devices with High Room-temperature Figures of Merit, *Nature*, 413, 597.
- [7] D.G. Cahill, K. Goodson, and A. Majumdar, 2002, Thermometry and Thermal Transport in Micro/Nanoscale Solid-State Devices and Structures, *Journal of Heat Transfer*, 124, 223.
- [8] T. Yao, 1987, Thermal Properties of AlAs/GaAs Superlattice, *Applied Physics Letters*, 51, 1798.
- [9] X. Y. Yu, G. Chen, A. Verma, and J. S. Smith, 1995, Temperature Dependence of Thermophysical Properties of GaAs/AlAs Periodic Structure, *Applied Physics Letters*, 67, 3554.
- [10] X. Y. Yu, L. Zhang, and G. Chen, 1996, Thermal-Wave Measurement of Thin-Film Thermal Diffusivity with Different Laser Beam Configurations, *Review of Scientific Instruments*, 67, 2312.
- [11] W. L. Liu, T. Borca-Tasciuc, and J. L. Liu, 2001, In-plane Thermoelectric Properties of Si/Ge Superlattice, in *20th International Conference on Thermoelectrics: IEEE*, 340.
- [12] B. Yang, W. L. Liu, and J. L. Liu, 2002, Measurement of Anisotropic Thermoelectric Properties in Superlattices, *Applied Physics Letters*, 81, 3588.

- [13] R. Venkatasubramanian, 2000, Lattice Thermal Conductivity Reduction and Phonon Localizationlike Behavior in Superlattice Structures, *Physical Review B*, 61, 3091.
- [14] R. Venkatasubramanian, 2001, Thin-Film Thermoelectric Devices with High Room-temperature Figures of Merit, *Nature*, 413, 597.
- [15] J.M. Ziman, 2001, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press.
- [16] P. Hyldgaard and G.D. Mahan, 1996, Phonon Knudsen flow in GaAs/AlAs Superlattices, *Thermal Conductivity*, 23, 172.
- [17] A. Balandin and K. L. Wang, 1998, Significant Decrease of the Lattice Thermal Conductivity Due to Phonon Confinement in a Free-Standing Semiconductor Quantum Well, *Physical Review B*, 58, 1544.
- [18] A. Khitun, A. Balandin, and K. L. Wang, 1999, Modification of the Lattice Thermal Conductivity in Silicon Quantum Wires Due to Spatial Confinement of Acoustic Phonons, *Superlattices and Microstructures*, 26, 181.
- [19] J. Zou and A. Balandin, 2001, Phonon Heat Conduction in a Semiconductor Nanowire, *Journal of Applied Physics*, 89, 2932.
- [20] R. Prasher, 2006, Transverse Thermal Conductivity of Porous Materials Made from Aligned Nano- and Microcylindrical Pores, *Journal of Applied Physics*, 100, 064302.
- [21] G. Chen, 1997, Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures, *Journal of Heat Transfer*, 119, 220.
- [22] G. Chen, 1998, Thermal Conductivity and Ballistic-Phonon Transport in the Cross-Plane Direction of Superlattices, *Physical Review B*, 57, 14958.
- [23] M.J. Huang, W.Y. Chong, and T.M. Chang, 2006, The Lattice Thermal Conductivity of a Semiconductor Nanowire, *Journal of Applied Physics*, 99, 114318.
- [24] M.J. Huang, T.M. Chang and W.Y. Chong, 2007, A New Lattice Thermal Conductivity Model of a Thin Film Semiconductor, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50, 67.
- [25] 黃美嬌、劉又維、張泰鳴、鍾文彥，超晶格薄膜熱電控溫元件奈米效應

評估，工研院結案報告, 94-S-A46。

- [26] 劉又維，超晶格薄膜平面方向晶格熱傳導係數之分析，臺灣大學機械所碩士論文, June 2006。
- [27] R. Yang and G. Chen, 2004, Thermal Conductivity Modeling of Periodic Two-dimensional Nanocomposites, *Physical Review B*, 69, 195316.
- [28] Sheng-Yen Li, Hsin-Sen Chu, Wei-Mon Yan, 2008, Numerical Study of Phonon Radiative Transfer in Porous Nanostructures”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, 3924.
- [29] R.B. Peterson, 1994, Direct Simulation of Phonon-Mediated Heat Transfer in a Debye Crystal, *Journal of Heat Transfer*, 116, 815.
- [30] S. Mazumder and A. Majumdar, 2001, Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization, *Journal of Heat Transfer*, 123, 749.
- [31] Y. Chen, D. Li, J.R. Lukes, and A. Majumdar, 2005, Monte Carlo Simulation of Silicon Nanowire Thermal Conductivity, *Journal of Heat Transfer*, 127, 1129.
- [32] M.S. Jeng, R. Yang, D. Song, and G. Chen, 2008, Modeling the Thermal Conductivity and Phonon Transport in Nanoparticle Composites Using Monte Carlo Simulation, *Journal of Heat Transfer* 130, 042410.
- [33] D. Lacroix, K. Joulain, D. Terris and L. Lemonnier, 2006, Monte Carlo Simulation of Phonon Confinement in Silicon Nanostructures: Application to the Determination of the Thermal Conductivity of Silicon Nanowires, *Applied Physics Letters*, 89, 103104.
- [34] W. Tian and R. Yang, 2007, Thermal Conductivity Modeling of Compacted Nanowire Composites, *Journal of Applied Physics*, 101, 054320.
- [35] W. Tian and R. Yang, 2007, Effect of Interface Scattering on Phonon Thermal Conductivity Percolation in Random Nanowire Composites, *Applied Physics Letters*, 90, 263105.
- [36] A. L. Moore, S. K. Saha, R. S. Prasher, and L. Shi, 2008, Phonon Backscattering and Thermal Conductivity Suppression in Sawtooth Nanowires, *Applied Physics Letters*, 93, 083112.

- [37] D. P. Kennedy, 1960, Spreading Resistance in Cylindrical Semiconductor Devices, *Journal of Applied Physics*, 31, 1490.
- [38] S. Lee, S. Song, V. Au, K. Moran, 1995, Constriction/Spreading Resistance Model for Electronics Packaging, *ASME/JSME, Thermal Engineering conference*: 4, 199.
- [39] M. M. Yovanovich, Y. S. Muzychka, and J. R. Culham, 1999, Spreading Resistance of Isoflux Rectangles and Strips on Compound Flux Channels, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 13, 495.
- [40] Y. S. Muzychka, J. R. Culham and M. M. Yovanovich, 2003, Thermal Spreading Resistance of Eccentric Heat Sources on Rectangular Flux Channels, *Journal of Electronic Packaging*, 125, 178.
- [41] 蔡東峻，奈米複合材料聲子傳輸現象蒙地卡羅模擬法之研發，台灣大學機械所碩士論文，July 2009。
- [42] R. Yang and G. Chen, 2005, Thermal Conductivity Modeling of Core-Shell and Tubular Nanowires, *Nano Letters*, 5, 6, 1111.
- [43] R. Yang and G. Chen, 2005, Thermal Conductivity of Simple and Tubular Nanowire Composites in the Longitudinal Direction, *Physical Review B*, 72, 125418.
- [44] <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/>
- [45] Mei-Jiau Huang, Tung-Chun Tsai, Liang-Chun Liu, Ming-shan Jeng, and Chang-Chung Yang, 2009, Development of a Fast Monte-Carlo Solver for Phonon Transport in Nanostructured Semiconductors, *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 42, 2, 107.
- [46] 張天曜，薄膜之熱傳導係數量測方法研究，台灣大學機械所碩士論文，July 2007。

圖表

表 3.1 Ge(Si)粗糙介面週期測試的模擬參數; $N_{percell}$ 表示初始條件中每一網格內的聲子數。

Periods	Domain(nm^3) ($x \times y \times \text{depth}$)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q $\text{meV}/(\text{ps} \cdot \text{nm}^2)$	k ($\text{W}/\text{m} \cdot \text{K}$)
1×1	13×13×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	60	2.73
1×3	39×13×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	16	3.00
1×5	65×13×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	13	2.99
3×3	39×39×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	21.7	2.99

表 3.2 Ge(Si)光滑介面週期測試的模擬參數。

Periods	Domain(nm^3) ($x \times y \times \text{depth}$)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q $\text{meV}/(\text{ps} \cdot \text{nm}^2)$	k ($\text{W}/\text{m} \cdot \text{K}$)
1×3	72×24×10	1	1	0.2	1.46	500	972	140	36.68
1×5	120×24×10	1	1	0.2	1.46	500	972	84	37.10

表 3.3a 粗糙介面 $L_1 = 10nm$ 的模擬參數，模擬區間為 1×3 週期。

Ge(Si)模擬，固定矽奈米線尺寸為 $L_1 = 10nm$ 。

L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
12	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	19
13	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	16
13.5	0.25	0.25	0.05	1.09	500	972	26
14	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	23
18	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	32.5
20	1	1	0.2	1.02	500	973	36
24	1	1	0.2	1.46	500	972	40

Si(Ge)模擬，固定鍺奈米線尺寸為 $L_1 = 10nm$ 。

L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
12	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	21
13	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	24
13.5	0.25	0.25	0.05	1.09	500	972	26
14	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	30
18	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	50
20	1	1	0.2	1.02	500	973	58
24	1	1	0.2	1.46	500	972	72

表 3.3b 粗糙介面 $L_1 = 50nm$ 的模擬參數，模擬區間為 1×3 週期。

Ge(Si)模擬，固定鍺奈米線尺寸為 $L_1 = 50nm$ 。

L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
60	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	17
65	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	17
67.5	1.25	1.25	0.25	1.36	500	972	22
70	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	20
75	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	21
100	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	21
120	5	5	1	1.82	500	972	24

Si(Ge)模擬，固定鍺奈米線尺寸為 $L_1 = 50nm$ 。

L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
60	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	17
65	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	20
67.5	1.25	1.25	0.25	1.36	500	972	22
70	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	23
75	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	26
100	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	37
120	5	5	1	1.82	500	972	41

表 3.4 Si(Ge)光滑介面的模擬參數。

固定鍺奈米線尺寸為 $L_1 = 10nm$

Periods	L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
1×9	13	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	117
1×7	15	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	125
1×7	18	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	123
1×5	20	1	1	0.2	1.02	500	973	186
1×5	24	1	1	0.2	1.46	500	972	170

固定鍺奈米線尺寸為 $L_1 = 50nm$

Periods	L_2 (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
1×5	65	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	60
1×5	75	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	48
1×3	100	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	80
1×3	120	5	5	1	1.82	500	972	77

表 3.5 Ge(Si)光滑界面的模擬參數。

固定矽奈米線尺寸為 $L_1 = 10nm$

Periods	Domain(nm^3) ($x \times y \times depth$)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
1×3	39×13×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	255
1×3	42×14×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	220
1×3	48×16×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	197
1×3	54×18×30	0.5	0.5	0.1	1.09	500	972	180
1×3	60×20×7	1	1	0.2	1.02	500	973	160
1×3	72×24×10	1	1	0.2	1.46	500	972	140

固定矽奈米線尺寸為 $L_1 = 50nm$

Periods	Domain(nm^3) ($x \times y \times depth$)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$ (Si)	$N_{percell}$ (Ge)	q meV/(ps · nm ²)
1×3	195×65×2	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	85
1×3	210×70×2	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	78
1×3	225×75×2	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	70
1×3	255×85×2	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	56
1×3	300×100×2	2.5	2.5	0.5	1.82	500	972	50
1×3	360×120×0.5	5	5	1	1.82	500	972	40
1×3	510×170×0.5	5	5	1	1.82	500	972	29

表 3.6 絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$) 網格測試的模擬參數。

Domain (nm^3) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	N_{percell}	q meV/(ps · nm ²)	k (W/m · K)
60×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	29.3	5.25
100×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	17.6	5.20
150×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	11.7	5.25
200×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	8.8	5.25

表 3.7 週期性邊界網格測試的模擬參數。

Domain (nm^3) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	N_{percell}	q meV/(ps · nm ²)	k (W/m · K)
60×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	43.25	7.92
150×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	16.66	7.86

表 3.8a 絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$)， $L_1 = 10\text{nm}$ 的模擬參數。

Domain (nm^3) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	N_{percell}	q $\text{meV}/(\text{ps} \cdot \text{nm}^2)$
220×11×11	5.5	0.5	0.5	0.1	$W_{Si} : 1.00$ $W_{Ge} : 1.79$	$N_{Si} : 100$ $N_{Ge} : 109$	10.7
120×12×12	3	1	1	0.2	$W_{Si} : 1.09$ $W_{Ge} : 1.95$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	15.00
100×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	17.06
80×20×20	2	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.14$ $W_{Ge} : 2.03$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	21.78
100×25×25	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{Si} : 1.42$ $W_{Ge} : 2.54$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	21.02
120×30×30	3	2	2	0.4	$W_{Si} : 4.37$ $W_{Ge} : 7.80$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	21.07
160×40×40	4	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 9.10$ $W_{Ge} : 16.24$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	21.26

表 3.8b 絕熱邊界(邊界光滑係數 $P_B = 0$)， $L_1 = 50nm$ 的模擬參數。

Domain(nm^3) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$	q meV/(ps · nm ²)
220×55×55	5.5	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 12.51$ $W_{Ge} : 22.33$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	40.5
240×60×60	6	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 13.65$ $W_{Ge} : 24.36$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	33.43
260×65×65	10	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 22.74$ $W_{Ge} : 40.60$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	28.11
320×80×80	8	5	5	1	$W_{Si} : 72.76$ $W_{Ge} : 129.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	20.20
360×90×90	8	5	5	1	$W_{Si} : 72.76$ $W_{Ge} : 129.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	17.93
440×110×110	11	5	5	1	$W_{Si} : 100.05$ $W_{Ge} : 178.64$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	15.57
480×120×120	12	5	5	1	$W_{Si} : 109.15$ $W_{Ge} : 194.88$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	14.97
600×150×150	15	12.5	12.5	2.5	$W_{Si} : 852.68$ $W_{Ge} : 1522.44$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	13.5
800×200×200	20	12.5	12.5	2.5	$W_{Si} : 1136.91$ $W_{Ge} : 2029.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	12.39

表 3.9a 週期性邊界， $L_1 = 10\text{nm}$ 的模擬參數。

Domain(nm^3) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	N_{percell}	q $\text{meV}/(\text{ps} \cdot \text{nm}^2)$
220×11×11	5.5	0.5	0.5	0.1	$W_{\text{Si}} : 1.00$ $W_{\text{Ge}} : 1.79$	$N_{\text{Si}} : 100$ $N_{\text{Ge}} : 109$	15.92
120×12×12	3	1	1	0.2	$W_{\text{Si}} : 1.09$ $W_{\text{Ge}} : 1.95$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	18.15
100×15×15	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{\text{Si}} : 1.42$ $W_{\text{Ge}} : 2.54$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	43.25
80×20×20	2	1.25	1.25	0.25	$W_{\text{Si}} : 1.14$ $W_{\text{Ge}} : 2.03$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	47.77
100×25×25	2.5	1.25	1.25	0.25	$W_{\text{Si}} : 1.42$ $W_{\text{Ge}} : 2.54$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	54.65
120×30×30	3	2	2	0.4	$W_{\text{Si}} : 4.37$ $W_{\text{Ge}} : 7.80$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	59.13
160×40×40	4	2.5	2.5	0.5	$W_{\text{Si}} : 9.10$ $W_{\text{Ge}} : 16.24$	$N_{\text{Si}} : 200$ $N_{\text{Ge}} : 218$	60.80

表 3.9b 週期性邊界， $L_1 = 50nm$ 的模擬參數。

Domain(nm ³) ($Z \times L_2 \times L_2$)	Δz (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{percell}$	q meV/(ps · nm ²)
220×55×55	5.5	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 12.51$ $W_{Ge} : 22.33$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	42.50
240×60×60	6	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 13.65$ $W_{Ge} : 24.36$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	35.91
260×65×65	10	2.5	2.5	0.5	$W_{Si} : 22.74$ $W_{Ge} : 40.60$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	32.23
320×80×80	8	5	5	1	$W_{Si} : 72.76$ $W_{Ge} : 129.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	27.10
360×90×90	8	5	5	1	$W_{Si} : 72.76$ $W_{Ge} : 129.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	26.35
440×110×110	11	5	5	1	$W_{Si} : 100.05$ $W_{Ge} : 178.64$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	25.20
800×200×200	20	12.5	12.5	2.5	$W_{Si} : 1136.91$ $W_{Ge} : 2029.91$	$N_{Si} : 200$ $N_{Ge} : 218$	18.06

表 4.1 與理論解比較之塊材尺寸的模擬參數。

Domain($\mu\text{ m}^3$) ($x \times y \times \text{depth}$)	$2a$ (μm)	Δx (μm)	Δy (μm)	Δt (ps)	W	$N_{\text{percell}}(\text{Si})$	q meV/(ps · nm ²)
10×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	50
10×50×1	2	0.25	0.25	45	39444.12	500	50

表 4.2 塊材模擬結果與解析解比較，標示 S 為模擬結果，標示 T 則為理論解。

	最高溫	最低溫	擴散熱阻佔整體熱阻之比例
不考慮熱傳導係數為溫度的函數(20×100)	S:435.4 T:446.3	S:310.8 T:310.9	S:0.66 T:0.71
不考慮熱傳導係數為溫度的函數(40×200)	S:447.9 T:453.7	S:310.4 T:310.8	S:0.69 T:0.71
考慮熱傳導係數為溫度的函數(20×100)	S:483.2 T:446.0	S:310.3 T:310.9	S:0.75 T:0.71
考慮熱傳導係數為溫度的函數(40×200)	S:521.8 T:453.5	S:310.4 T:310.8	S:0.79 T:0.71

表 4.3 矽薄膜 $2b = 50\mu\text{m}$ 、 500nm 的模擬參數。

$2b = 50\mu\text{m}$

Domain(μm^3) ($x \times y \times \text{depth}$)	Δx (μm)	Δy (μm)	Δt (ps)	W	$N_{\text{percell}}(\text{Si})$	q meV/(ps · nm ²)
100×50×0.00001	0.5	1	90	78.89	500	0.5

$2b = 500\text{nm}$

Domain(nm ³) ($x \times y \times \text{depth}$)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{\text{percell}}(\text{Si})$	q meV/(ps · nm ²)
1000×500×10	5	10	0.9	78.89	500	41.97

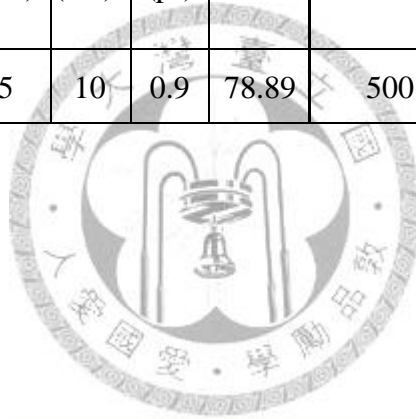


表 4.4 塊材與奈米尺寸下的模擬參數。

塊材尺寸

Domain(μm^3) ($x \times y \times \text{depth}$)	$2a$ (μm)	Δx (μm)	Δy (μm)	Δt (ps)	W	$N_{\text{percell}}(\text{Si})$	q meV/(ps · nm ²)
5×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	3
10×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	2
15×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	1.5
20×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	1
25×50×1	2	0.5	0.5	90	39444.12	500	0.7

奈米尺寸

Domain(nm ³) ($x \times y \times \text{depth}$)	$2a$ (nm)	Δx (nm)	Δy (nm)	Δt (ps)	W	$N_{\text{percell}}(\text{Si})$	q meV/(ps · nm ²)
50×500×1	20	5	5	0.9	3.94	500	7
100×500×1	20	5	5	0.9	3.94	500	7
150×500×1	20	5	5	0.9	3.94	500	7
200×500×1	20	5	5	0.9	3.94	500	7
250×500×1	20	5	5	0.9	3.94	500	7

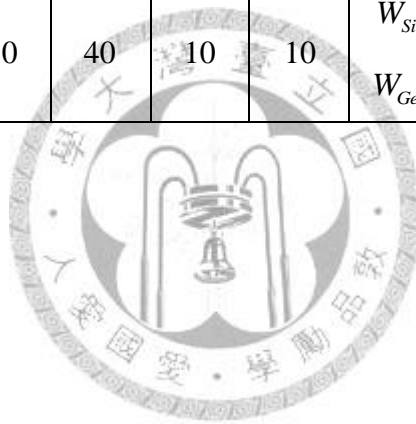
表 4.5 解析解、塊材與奈米材料模擬結果比較($k_{\text{bulk}}=134.25 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$)。

	解析解	塊材膜厚 $10\mu\text{m}$	奈米材料膜厚 100nm
總熱阻	1.536	1.770	25.875
厚度熱阻	0.239	0.239	0.239
對流熱阻	0.200	0.200	20
擴散熱阻	1.097	1.331	5.636
k_{eff}	24.0	20.4	5.45

熱阻單位： $(\text{ps}\cdot\text{K})/\text{eV}$ ； k_{eff} 單位： $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$

表 5.1 垂直平面方向之超晶格薄膜中加入 T 型結構之模擬參數。其中 $L=L_3=L_4$ 。

Domain(nm^2) ($x\times y$)	Grids ($x\times y$)	Δt (ps)	L (nm)	e (nm)	f (nm)	g (nm)	W	N_{percell}	q $\text{meV}/(\text{ps}\cdot\text{nm}^2)$
280x50	224x40	0.2	50	40	10	10	$W_{\text{Si}}: 1.14$ $W_{\text{Ge}}: 2.03$	$N_{\text{Si}}: 500$ $N_{\text{Ge}}: 545$	10



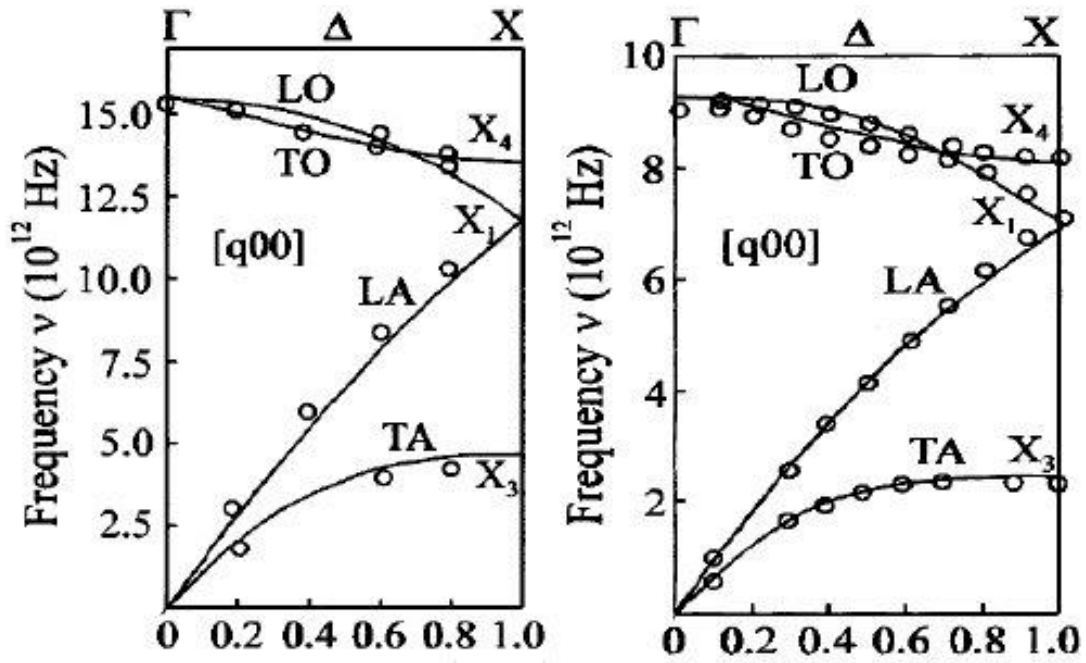


圖 2.1 實驗量測之矽(左)、鍺(右)[100]方向的色散關係曲線圖[44]。

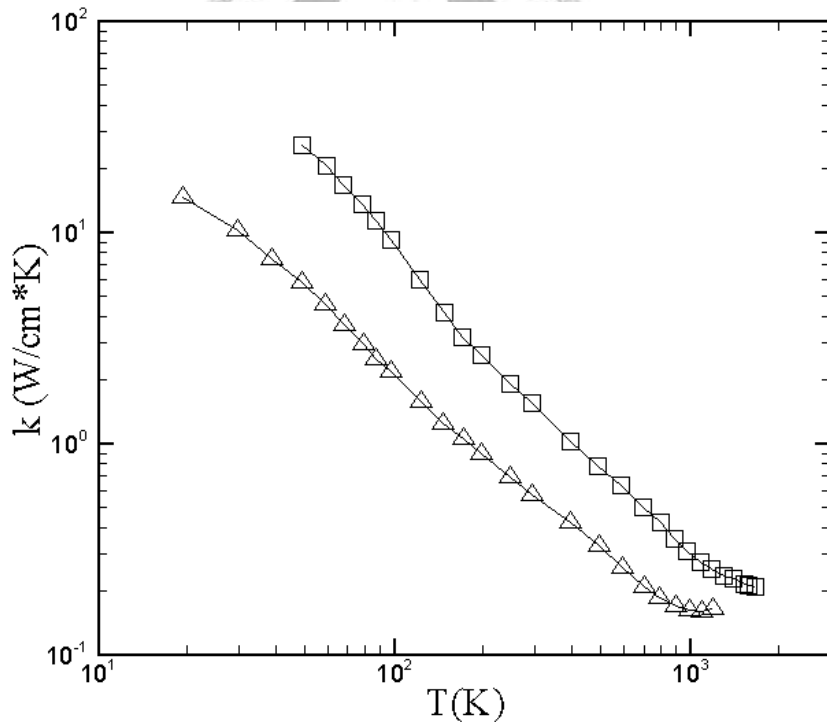


圖 2.2 實驗量測之矽(正方形)、鍺(三角形)的塊材熱傳導係數圖[2]。

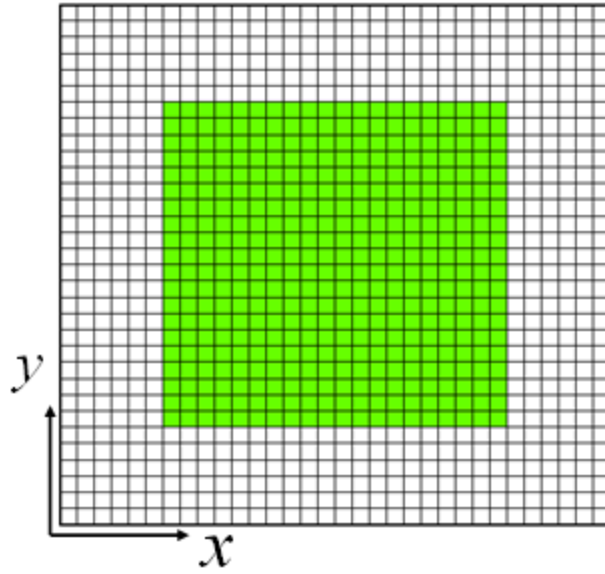


圖 2.3 矽-鍺奈米線複合材料垂直軸方向截面圖。

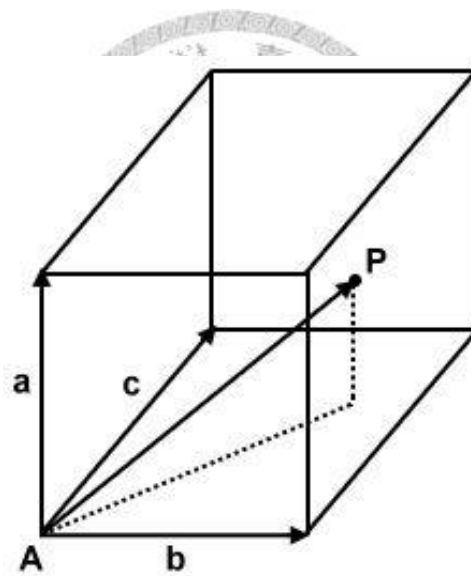


圖 2.4 聲子在三維網格中初始位置 P 的示意圖。

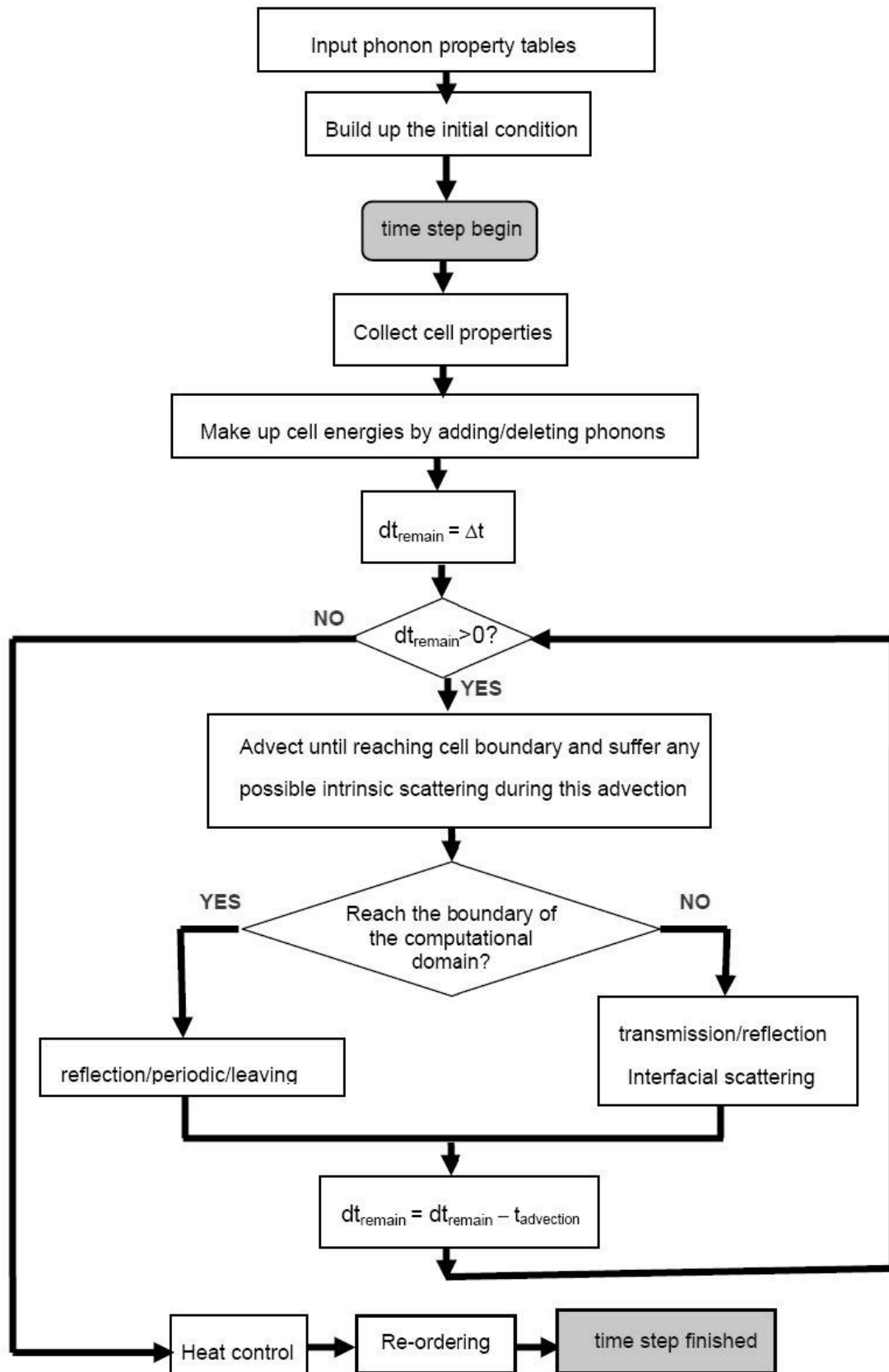


圖 2.5 蒙地卡羅法之模擬流程圖。

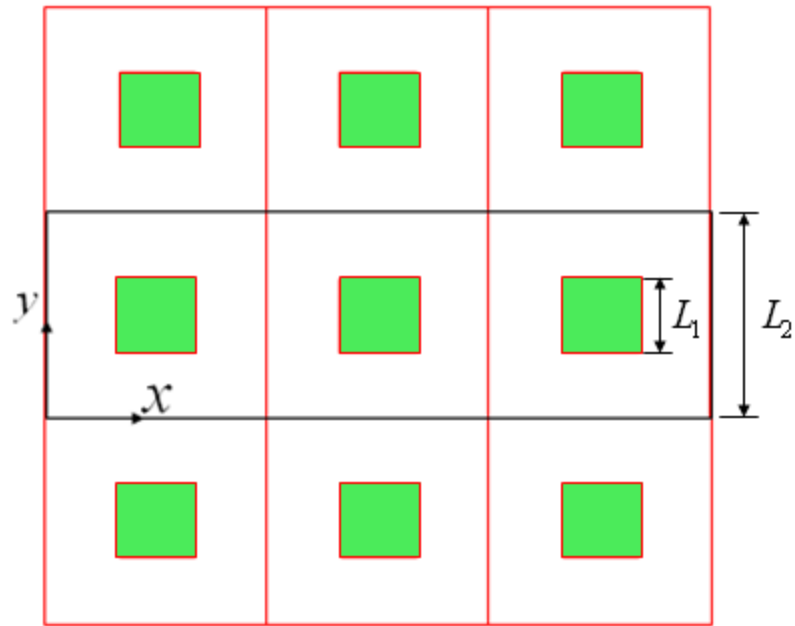


圖 3.1 3×3個週期模擬示意圖。



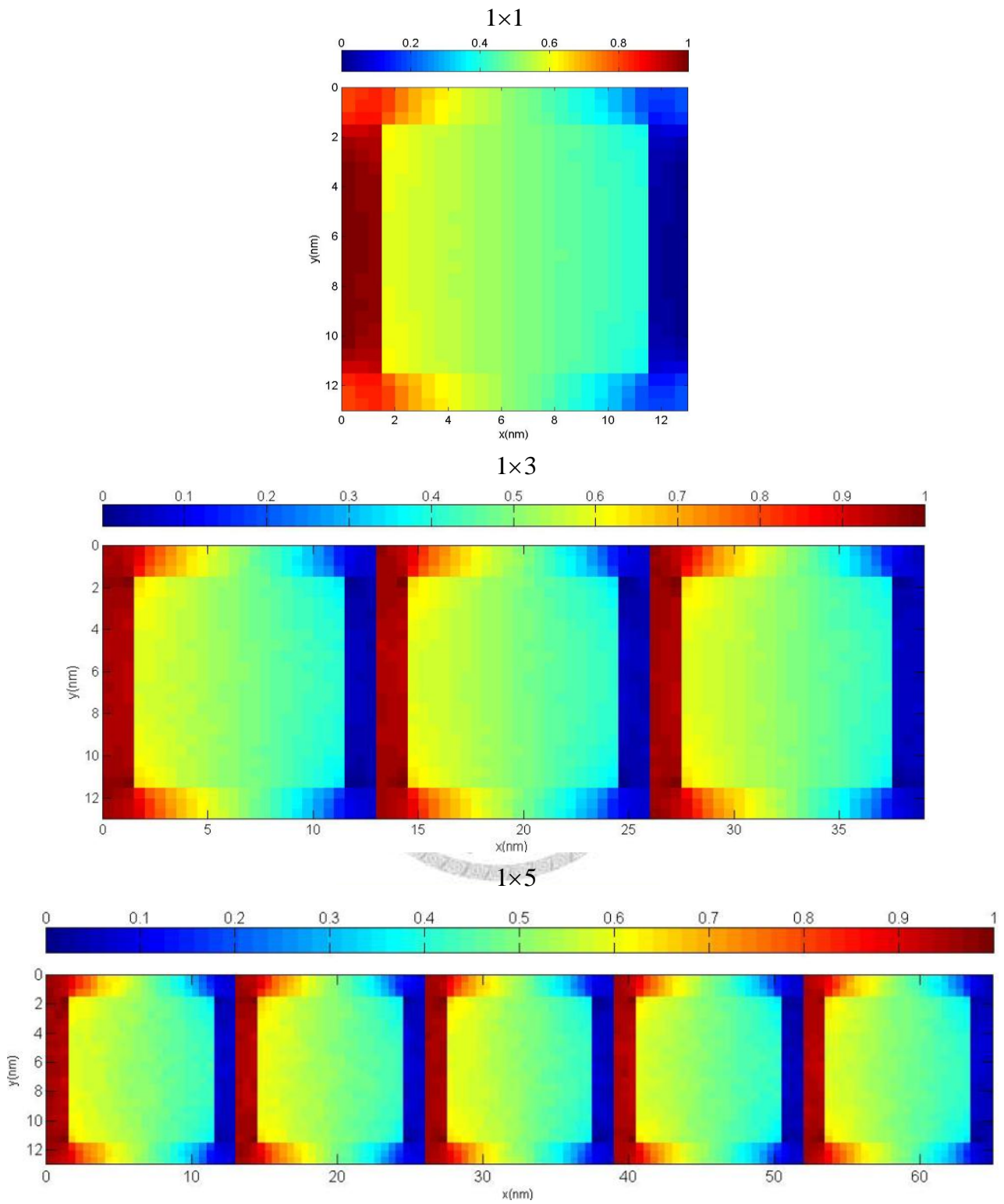


圖 3.2a 介面光滑係數 $P=0$ ， 1×1 、 1×3 、 1×5 週期之穩態無因次溫度分布圖， $(T-T_{\min})/(T_{\max}-T_{\min})$ ， T_{\max} 、 T_{\min} 分別為每一週期最高溫與最低溫。

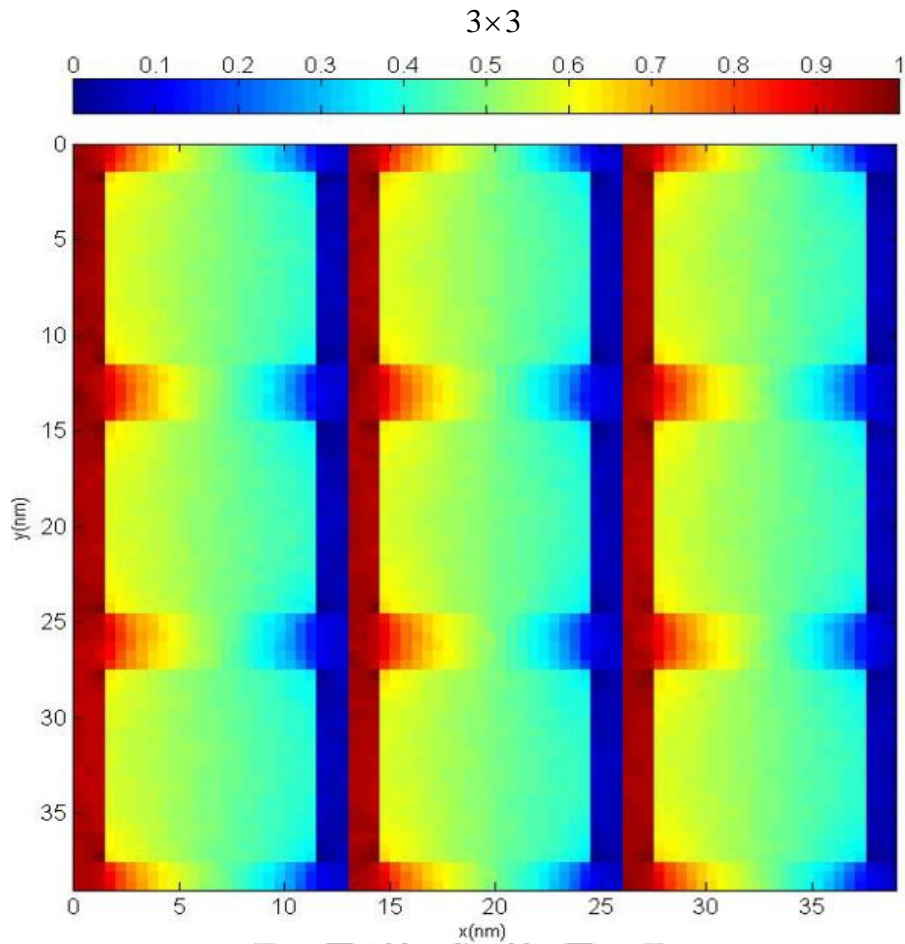


圖 3.2b 介面光滑係數 $P=0$ ， 3×3 週期之穩態無因次溫度分布圖， $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ ， T_{\max} 、 T_{\min} 分別為每一週期最高溫與最低溫。

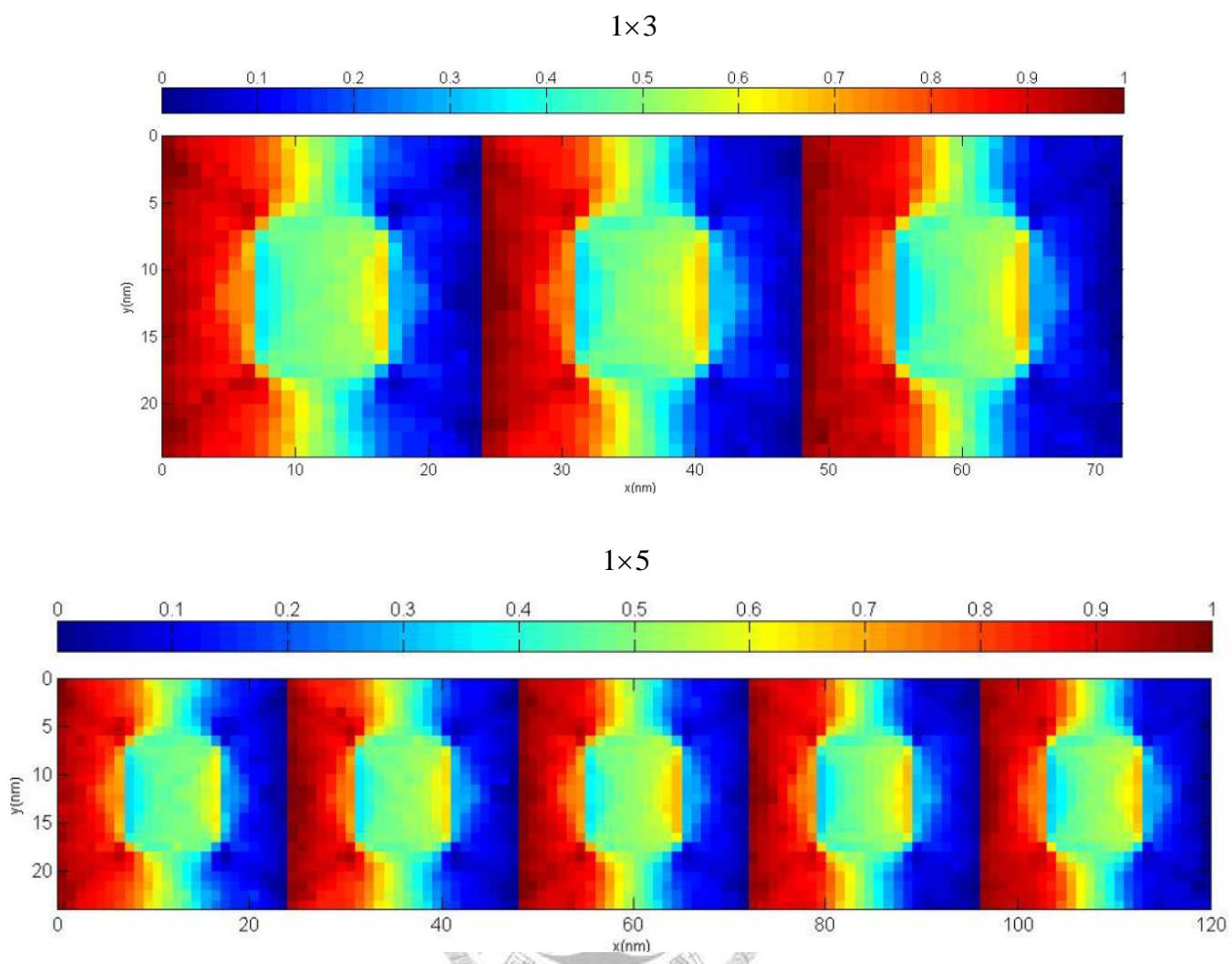


圖 3.3 介面光滑係數 $P=1$ ， 1×3 、 1×5 週期之穩態無因次溫度分布圖， $(T-T_{\min})/(T_{\max}-T_{\min})$ ， T_{\max} 、 T_{\min} 分別為每一週期最高溫與最低溫。

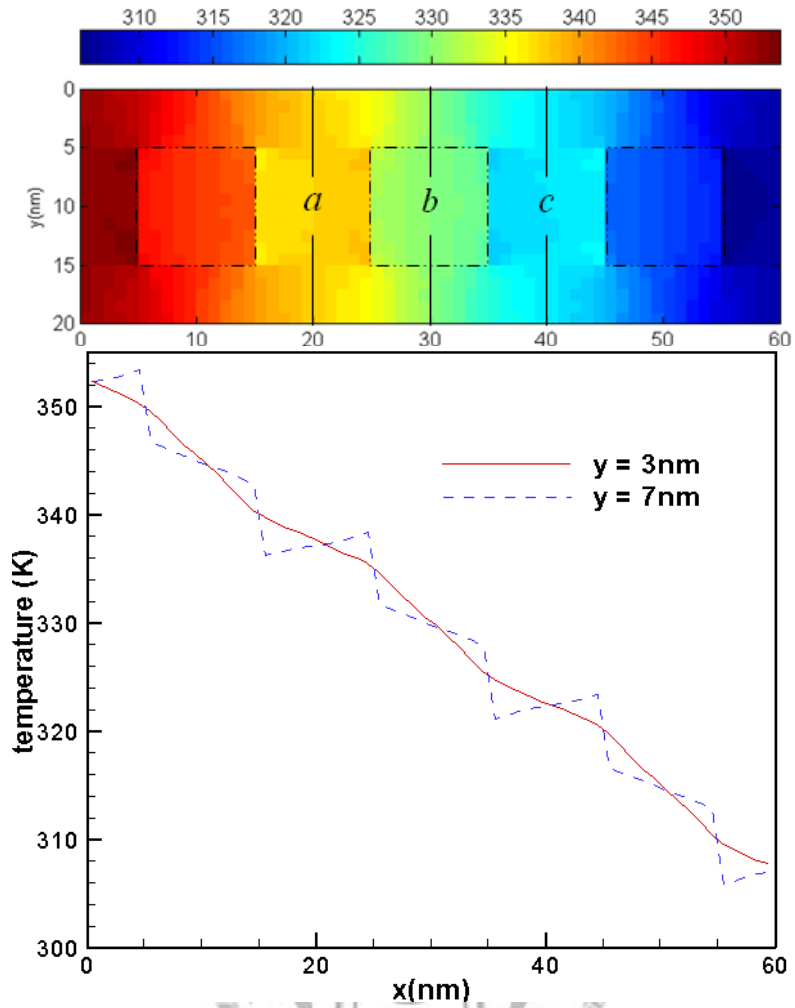


圖 3.4 鍺包覆矽奈米線—10nm之複合材料內溫度分布圖。

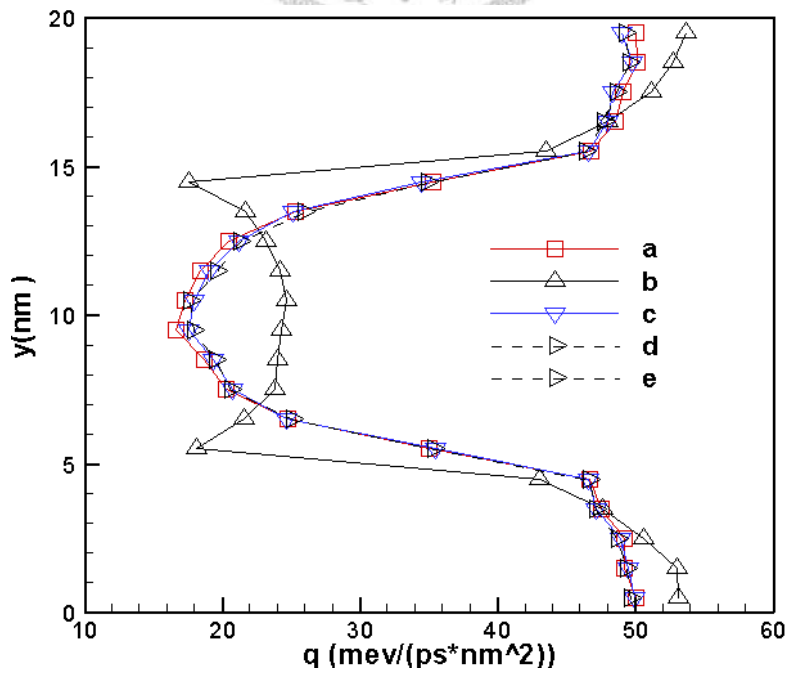


圖 3.5 鍺包覆矽奈米線—10nm 之複合材料截面上熱通量分布圖。

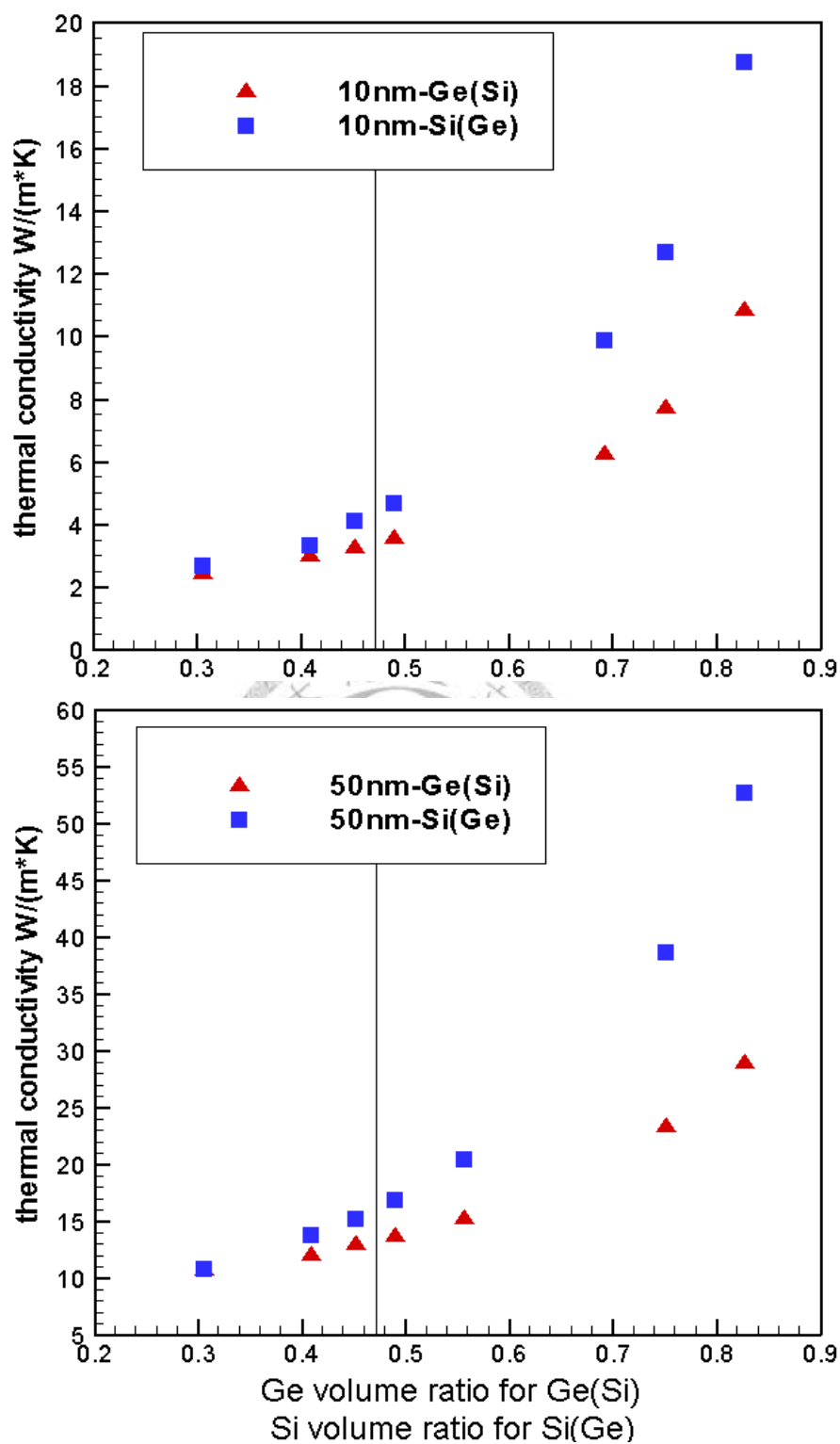


圖 3.6 粗糙界面的模擬結果，中間黑色線代表由塊材觀點算出的臨界體積。圖中數字代表奈米線之尺寸，Ge(Si)及Si(Ge)分別表示鍺包覆矽及矽包覆鍺奈米線。

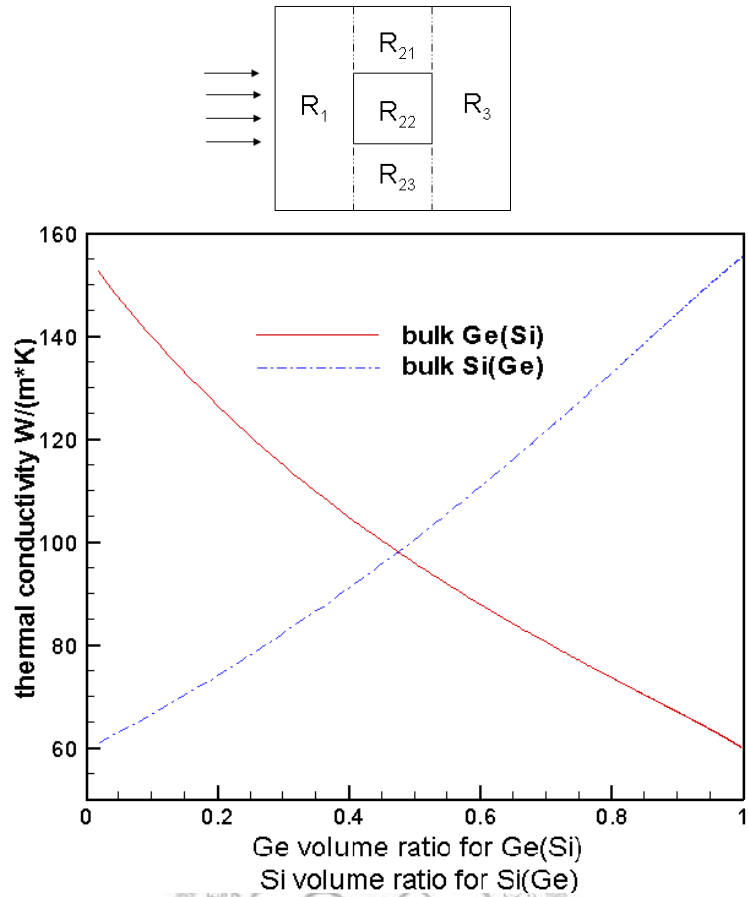


圖3.7 假設一維穩態熱傳導之熱阻示意圖及忽略介面影響之等效熱傳導係數。

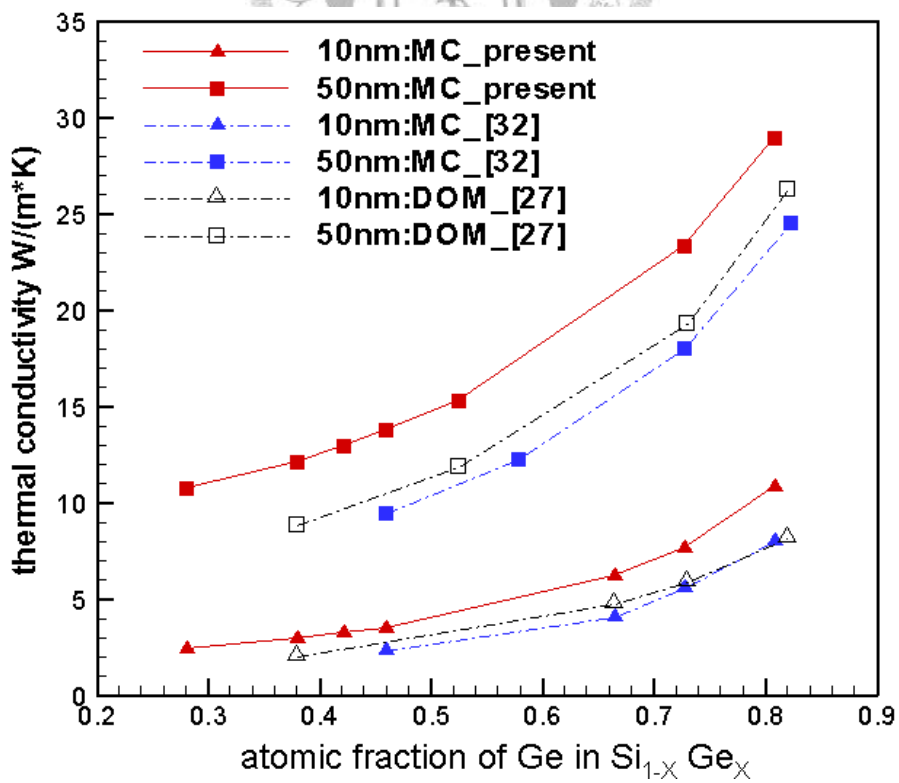


圖 3.8 與前人[27,32]比較之熱傳導係數， x 值表示鍺材佔整體材料的原子比例。

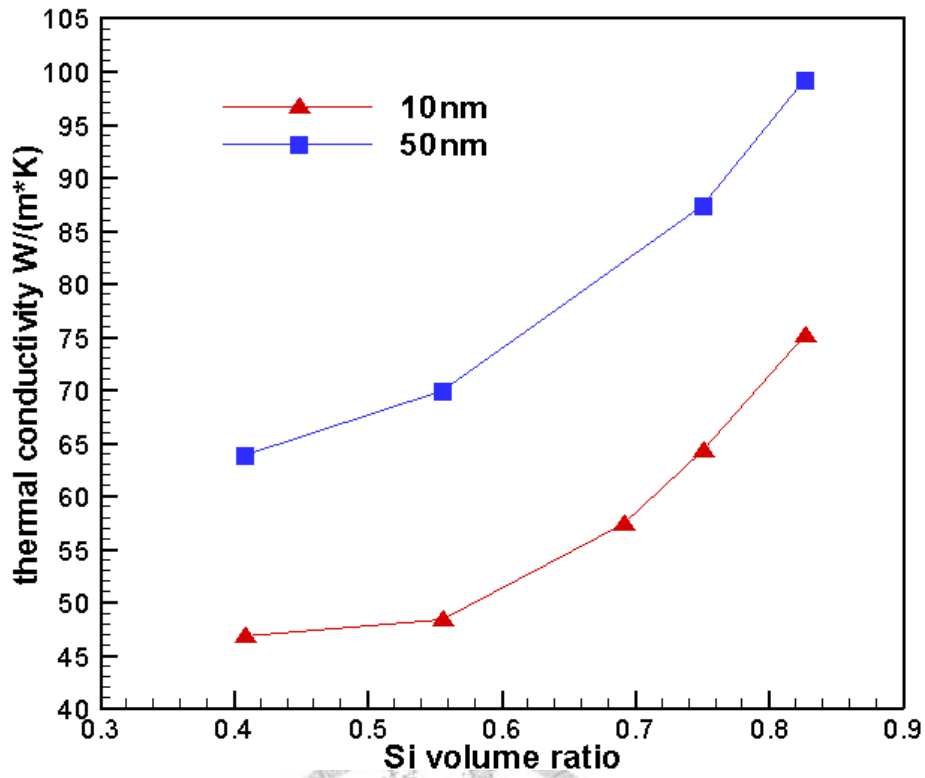


圖3.9 光滑介面矽包覆鍺的模擬結果。

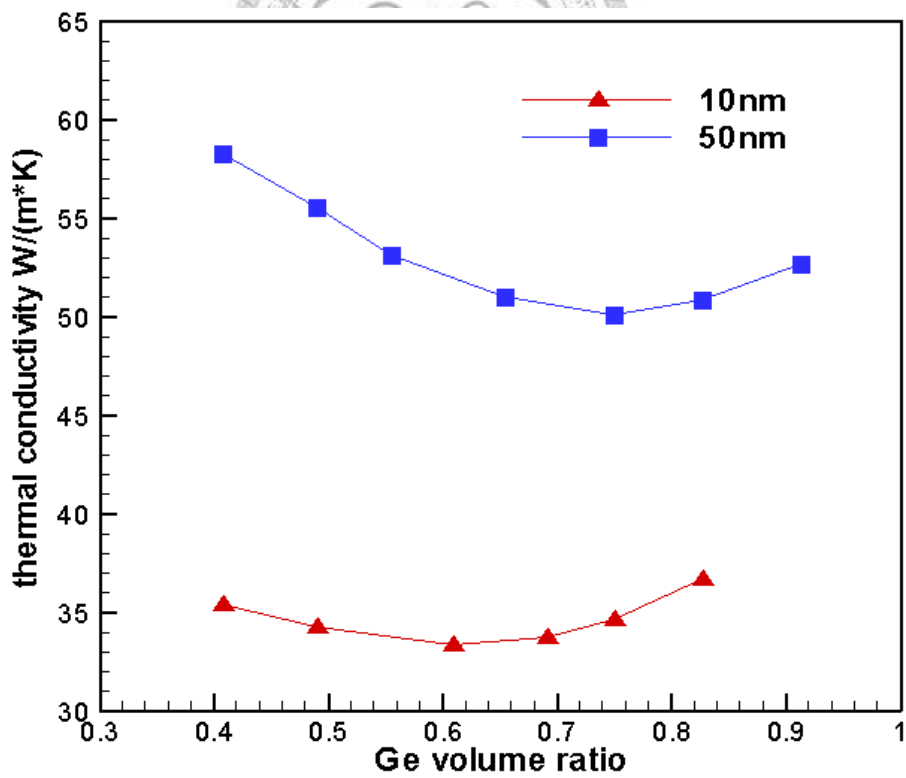


圖3.10 光滑介面鍺包覆矽的模擬結果。

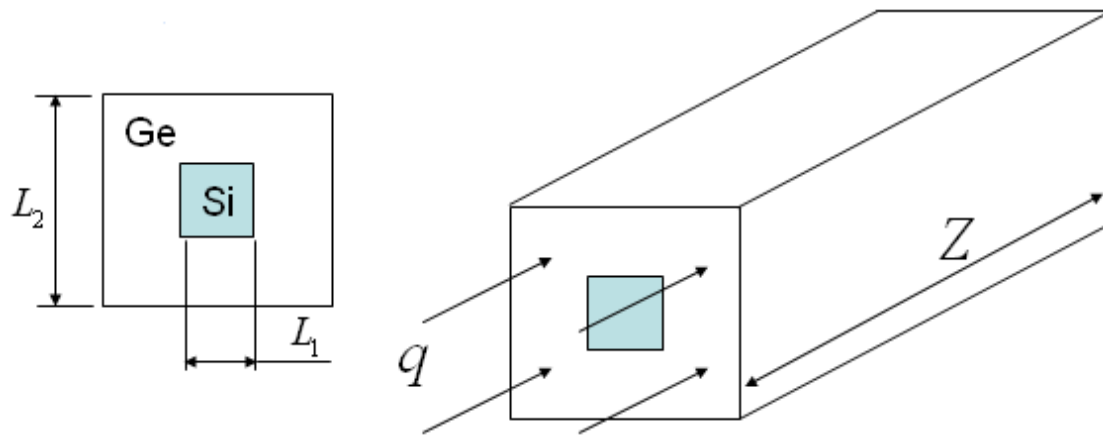


圖 3.11 3-2 節欲研究之材料示意圖。

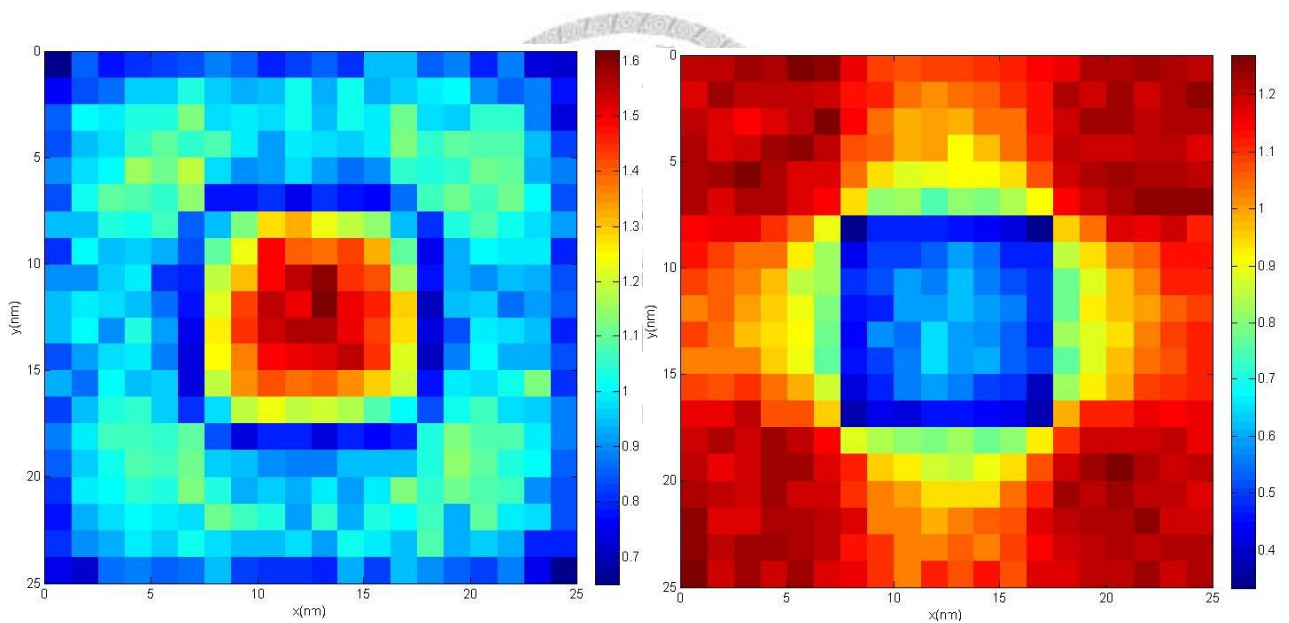


圖 3.12 左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界其中間截面的熱通量分布圖；右圖則代表與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界的熱通量分布圖。其中數值大小為熱通量除以該截面平均熱通量。

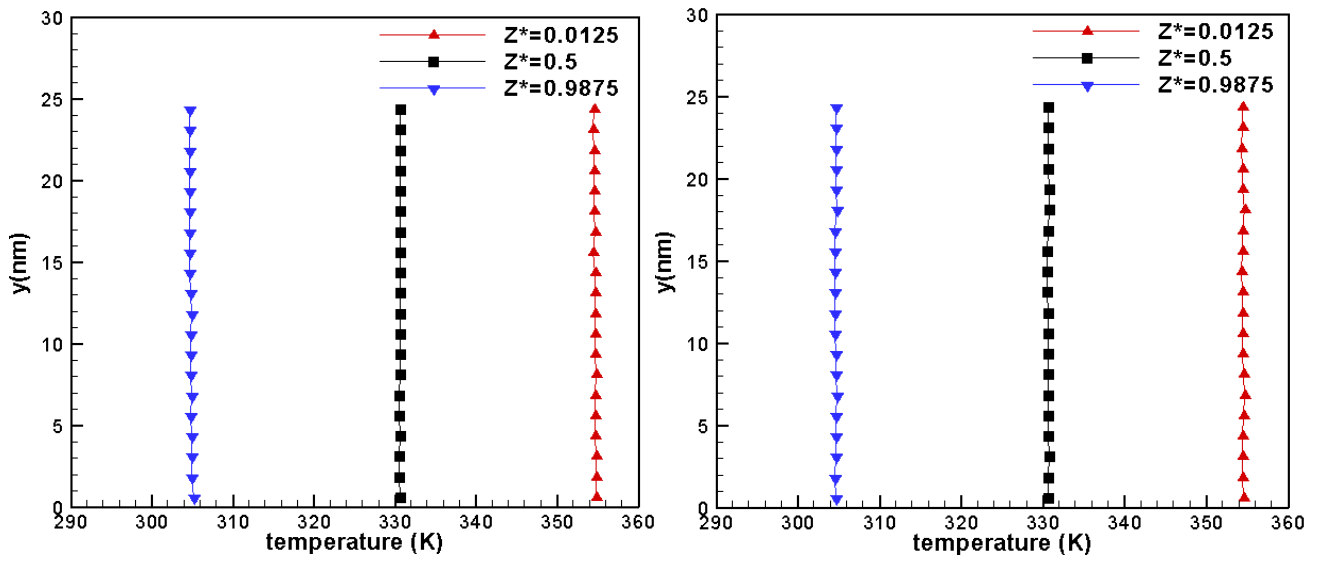


圖 3.13 左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界，其在三個截面下的溫度分布；右圖則為與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界其溫度分布圖。

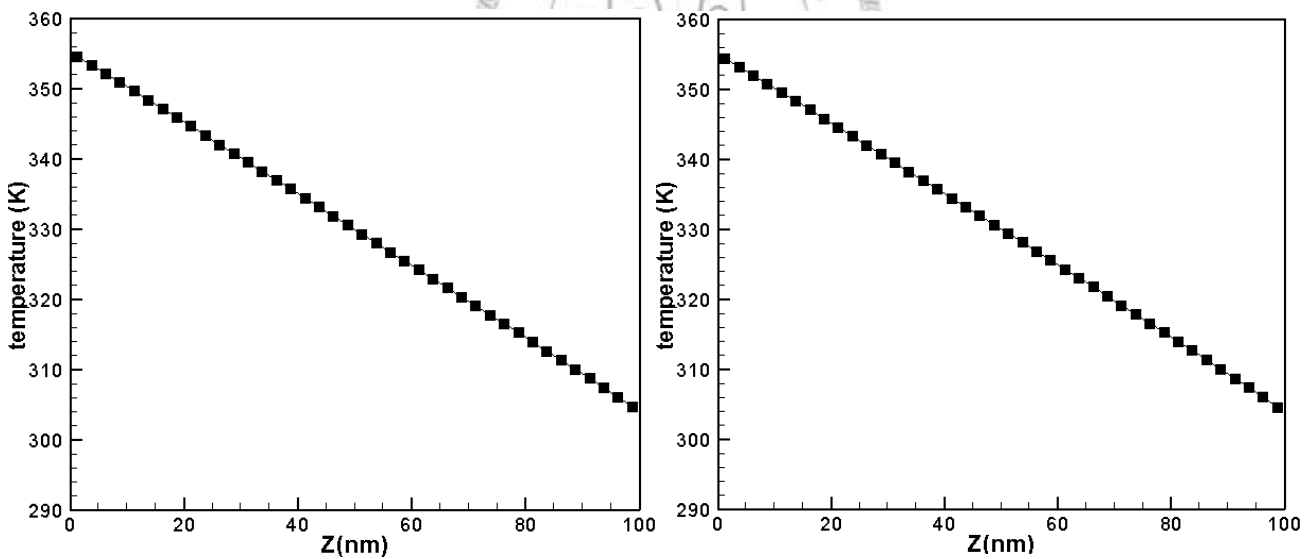


圖 3.14 左圖代表與熱傳方向平行的邊界為絕熱邊界，其熱傳方向平均溫度分布；右圖則為與熱傳方向平行的邊界為週期性邊界其溫度分布圖。

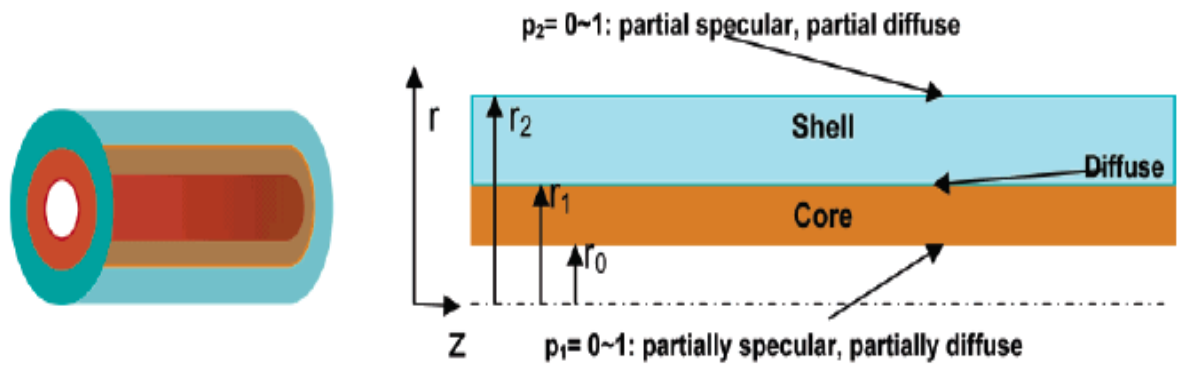


圖 3.15 Ref[42]之計算模型示意圖。

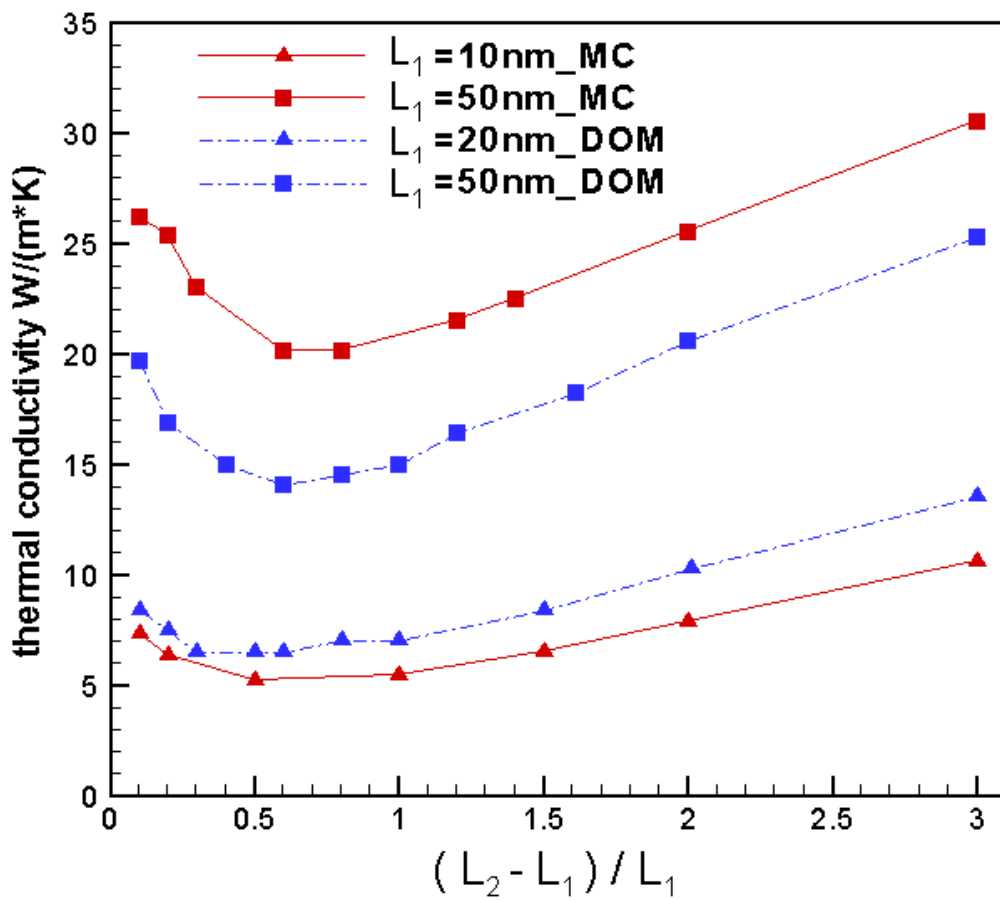


圖 3.16 垂直熱傳方向的邊界為絕熱邊界(粗糙介面)之模擬結果。標示 MC 為本論文的模擬結果，DOM 為前人[42]的研究結果。

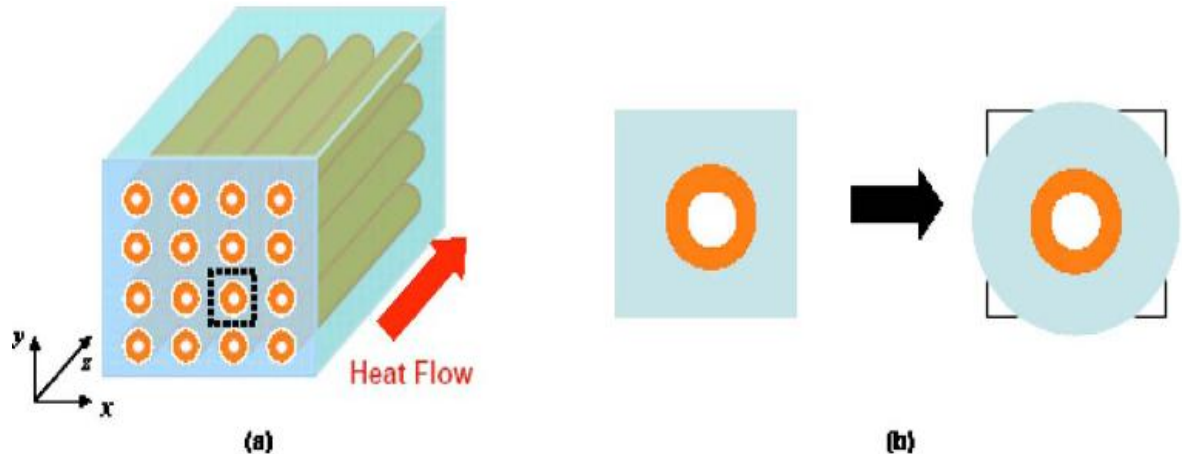


圖 3.17 (a)為鍺材料內嵌矽奈米管示意圖。(b)為前人[43]以同心圓材料加上鏡反射邊界來近似之示意圖。

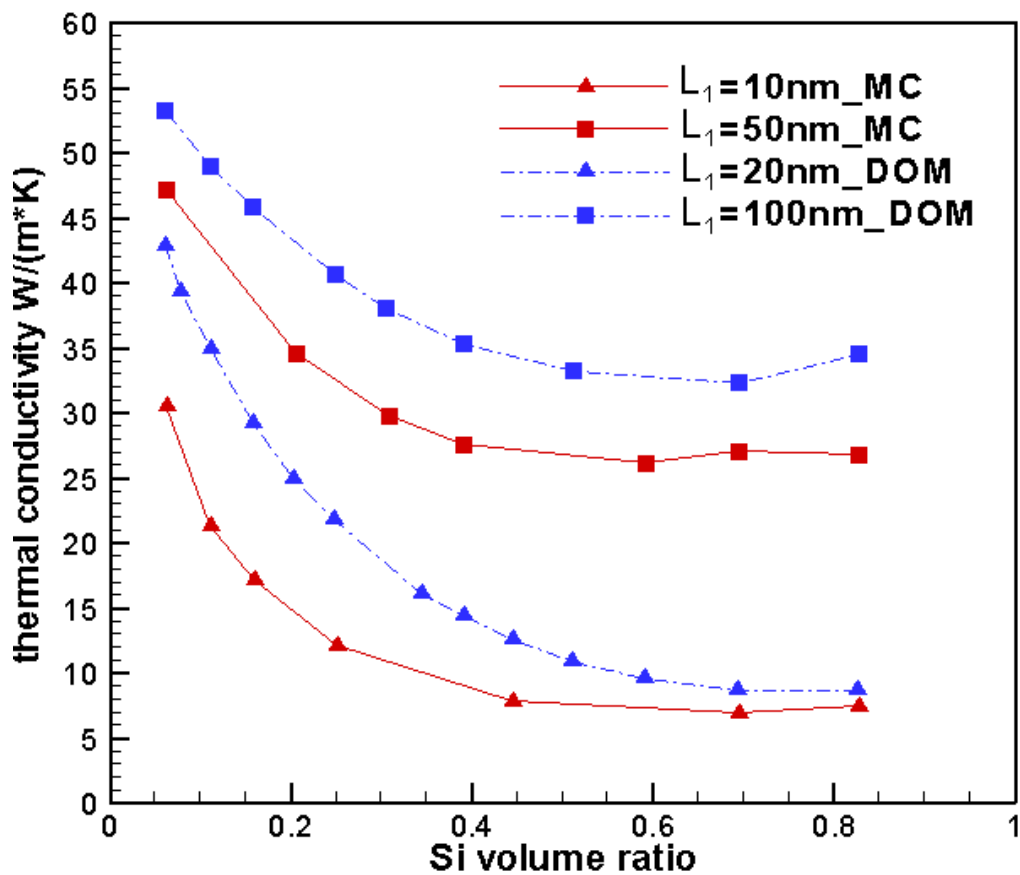


圖 3.18 垂直熱傳方向的邊界為週期性邊界的模擬結果。標示 MC 為本論文的模擬結果，DOM 為前人[43]的研究結果。

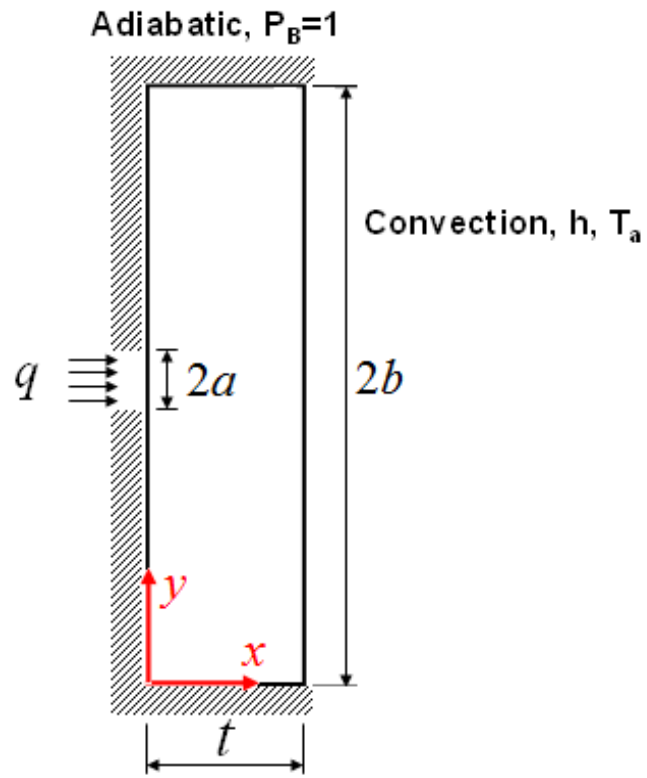


圖 4.1 擴散熱阻之模擬模型示意圖。



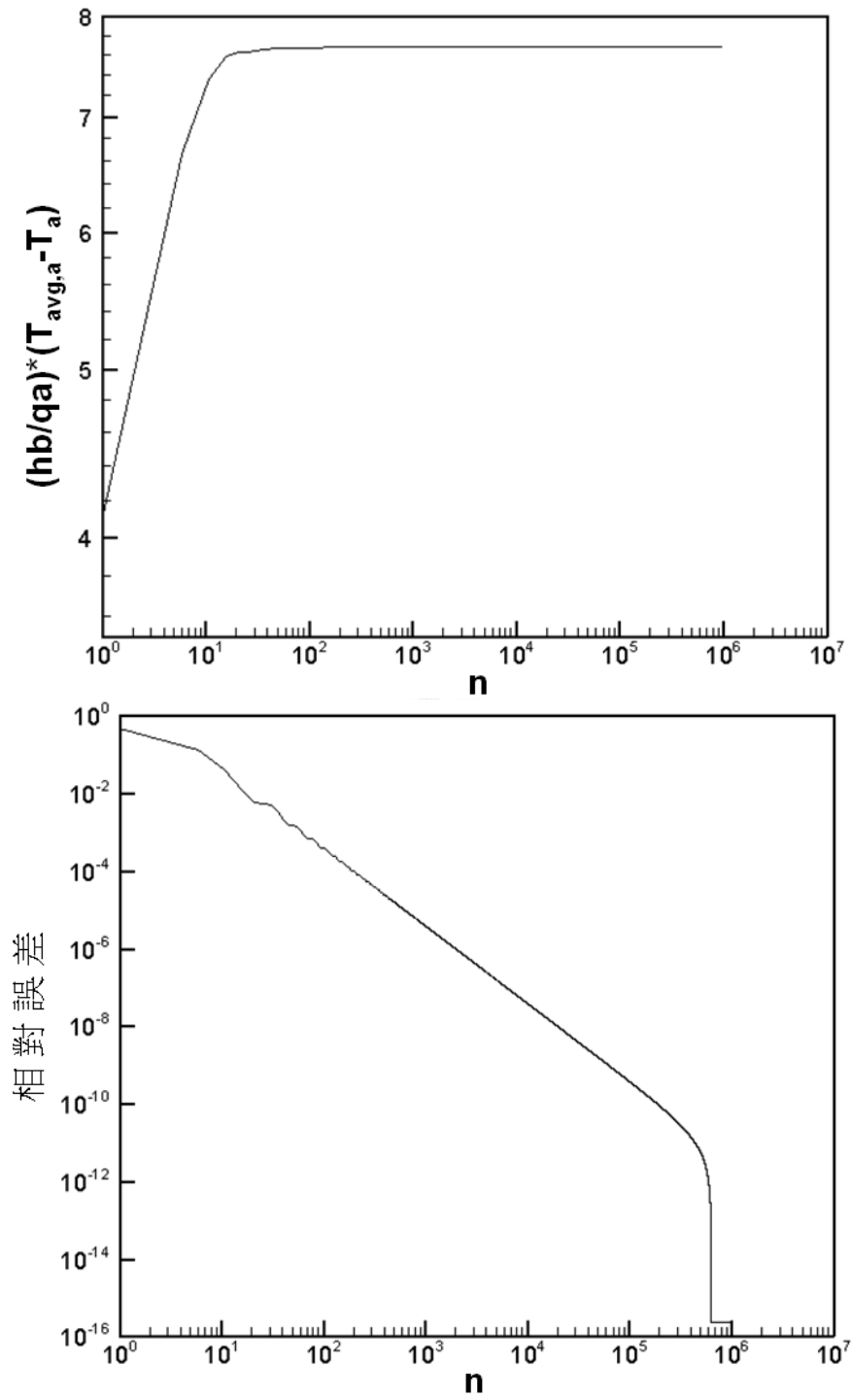


圖 4.2 二維穩態熱傳解析解收斂測試。

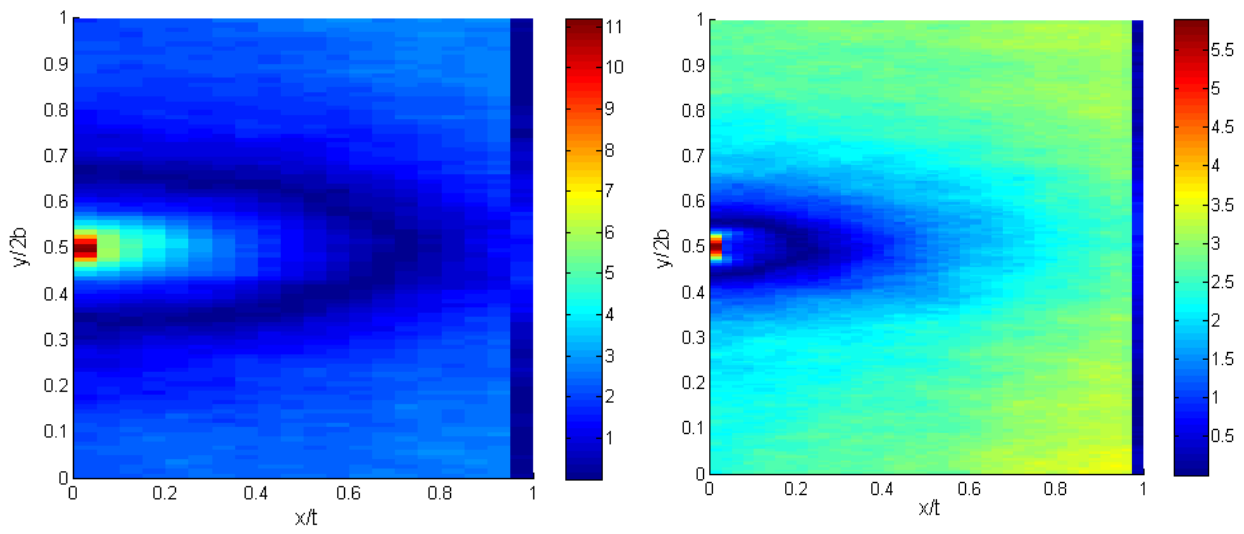


圖 4.3 不考慮熱傳導係數為溫度的函數之模擬結果誤差圖；網格加密前(左圖)最大誤差為 11.20 度，加密後(右圖)為 5.92 度。

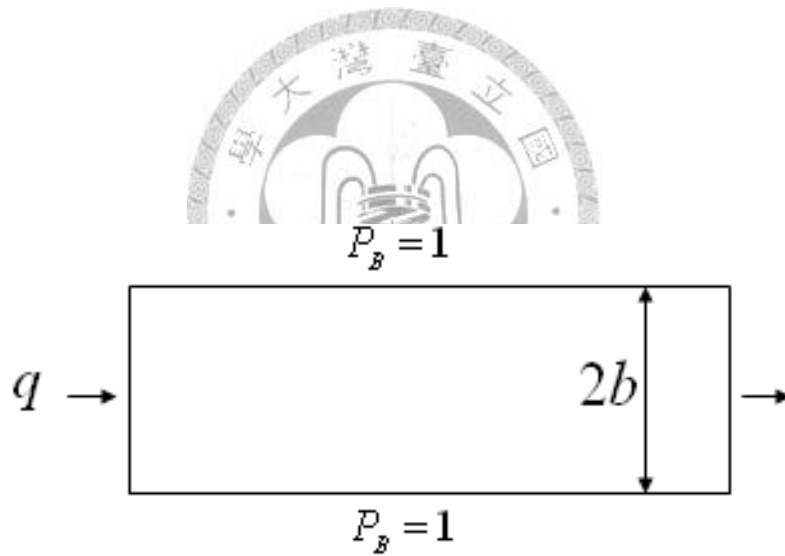


圖 4.4 矽薄膜模擬示意圖。

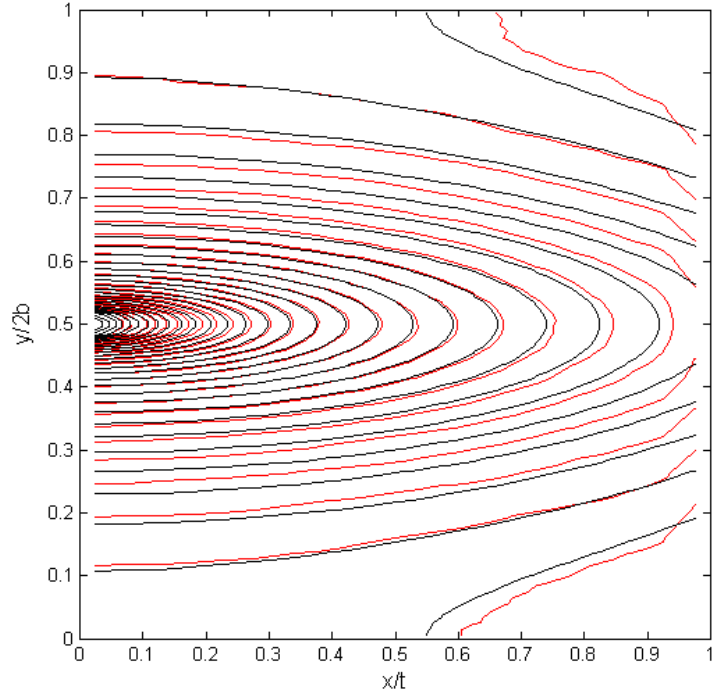


圖 4.5 解析解(黑線)與模擬(紅線)無因次溫度， $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ ，等高線圖。

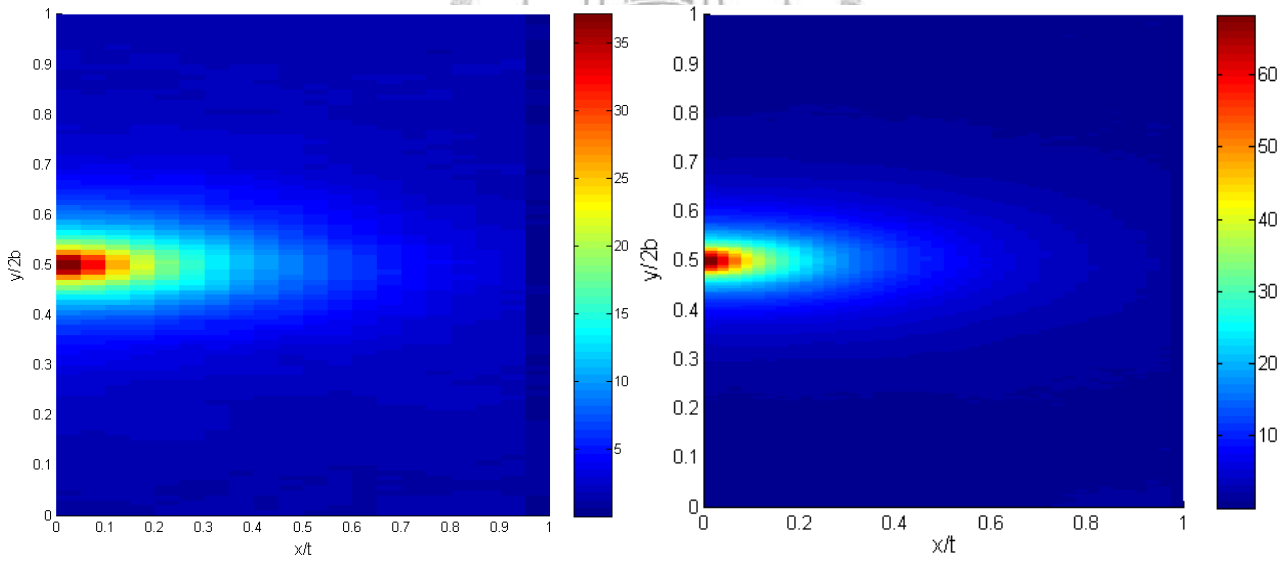


圖 4.6 考慮熱傳導係數為溫度的函數之模擬結果誤差圖；網格加密前(左圖)最大誤差為 37.2 度，加密後(右圖)為 68.3 度。

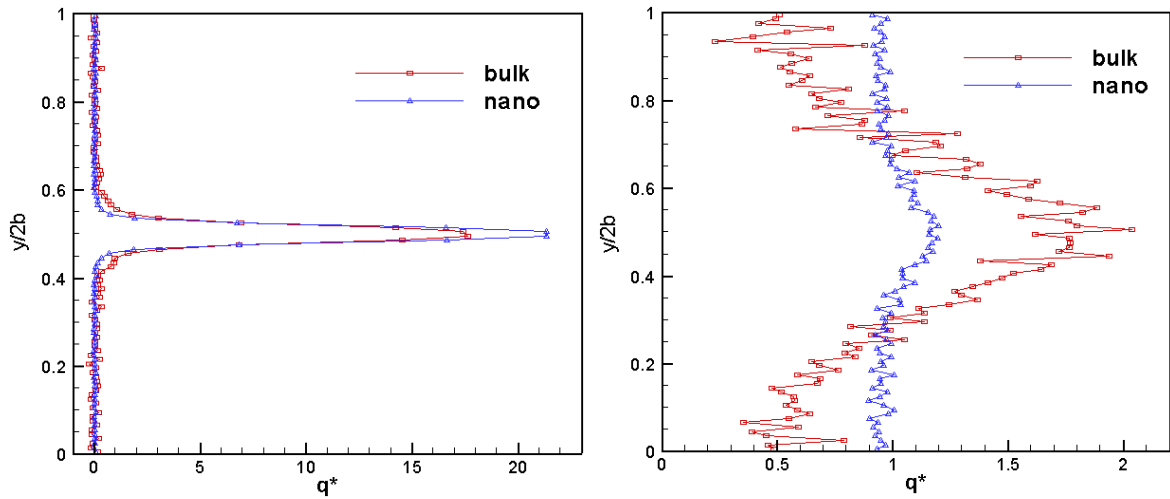


圖 4.7 塊材(紅色方形)及奈米材料(藍色三角形)在 $x/t = 0.05$ (左圖)、 0.95 (右圖)處截面上的熱通量分布圖。其中 q^* 為 q 除以平均熱通量。

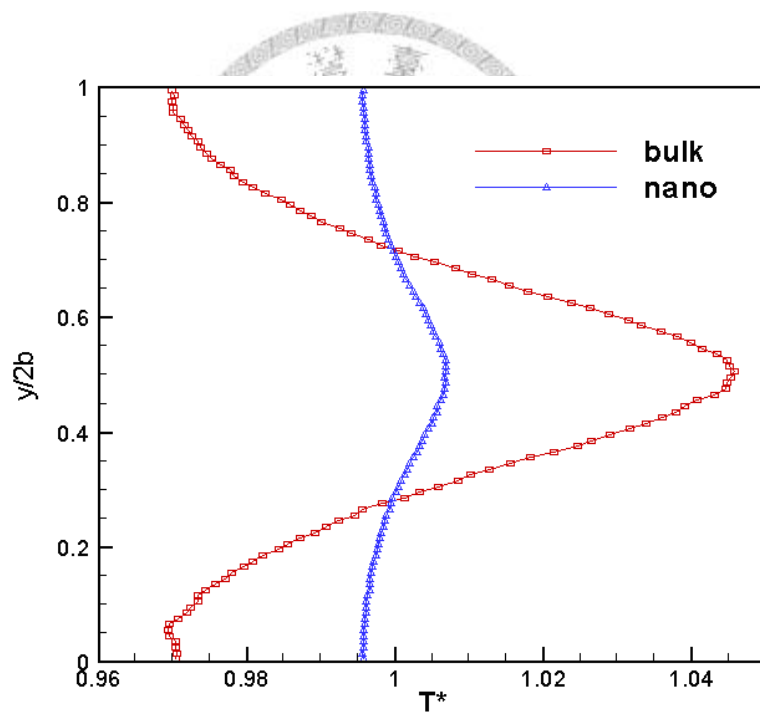


圖 4.8 塊材(紅色方形)及奈米材料(藍色三角形)在對流邊界 $x/t = 0.975$ 截面的溫度分布圖。其中 T^* 為 T 除以該截面平均溫度。

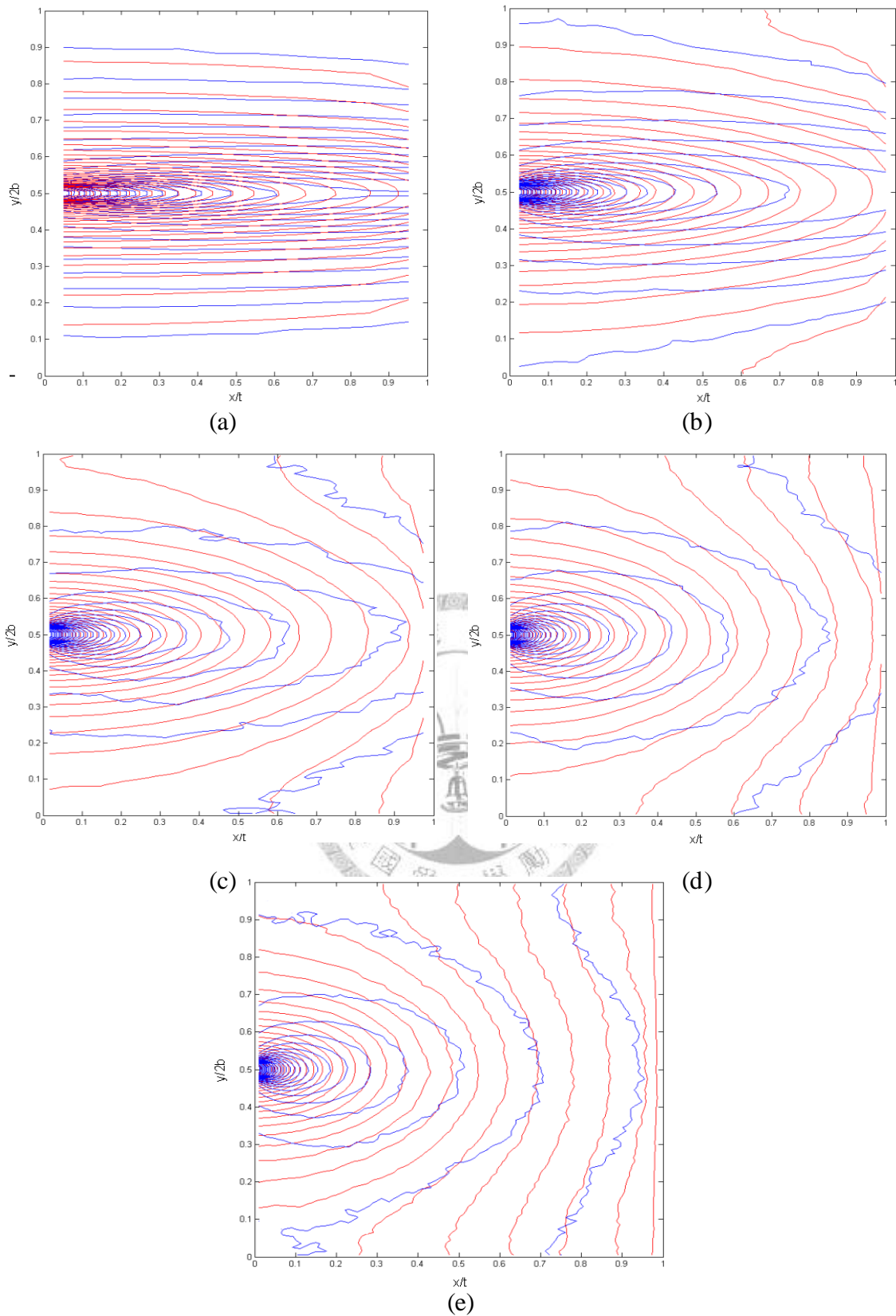


圖 4.9 膜厚 $5\mu\text{m}$ 與 50nm (a)， $10\mu\text{m}$ 與 100nm (b)， $15\mu\text{m}$ 與 150nm (c)， $20\mu\text{m}$ 與 200nm (d)， $25\mu\text{m}$ 與 250nm (e)，無因次溫度， $(T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ ，等高線圖。紅色線條代表塊材、藍色線條代表奈米材料。

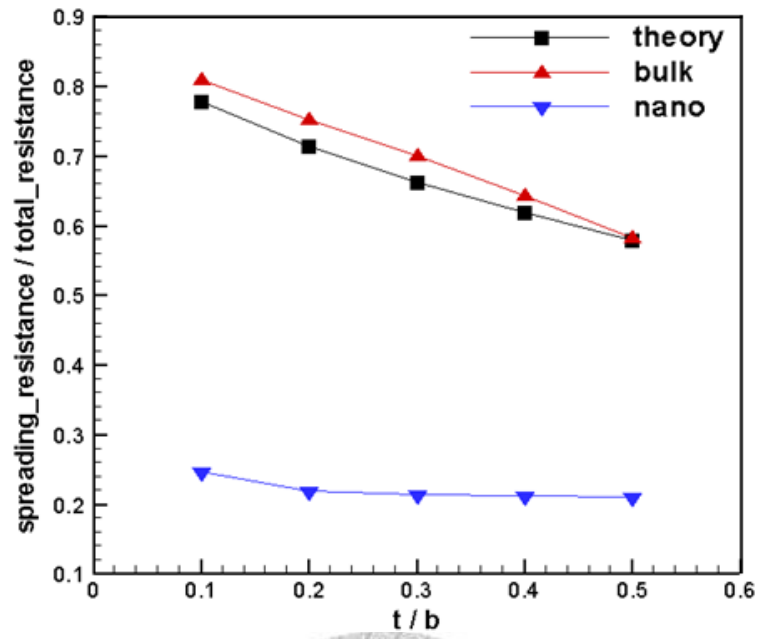


圖 4.10 擴散熱阻所佔總熱阻之比例。

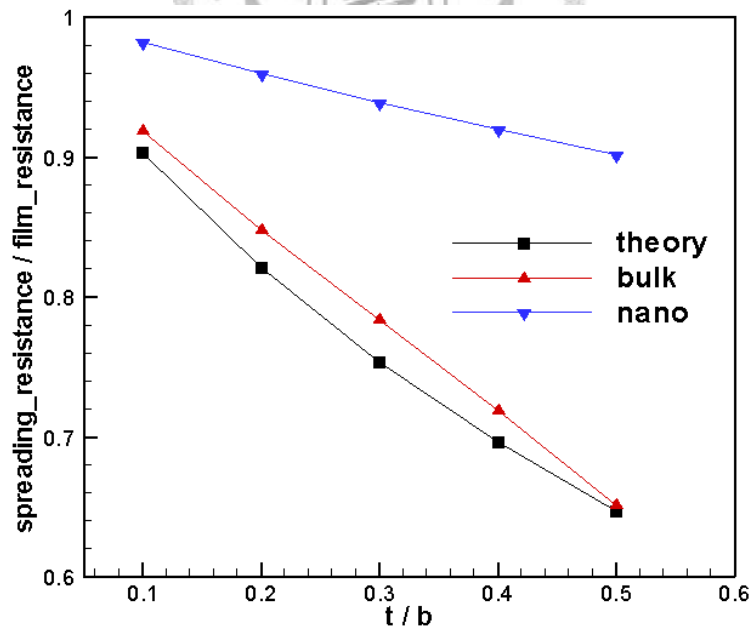


圖 4.11 擴散熱阻佔膜熱阻之比例。

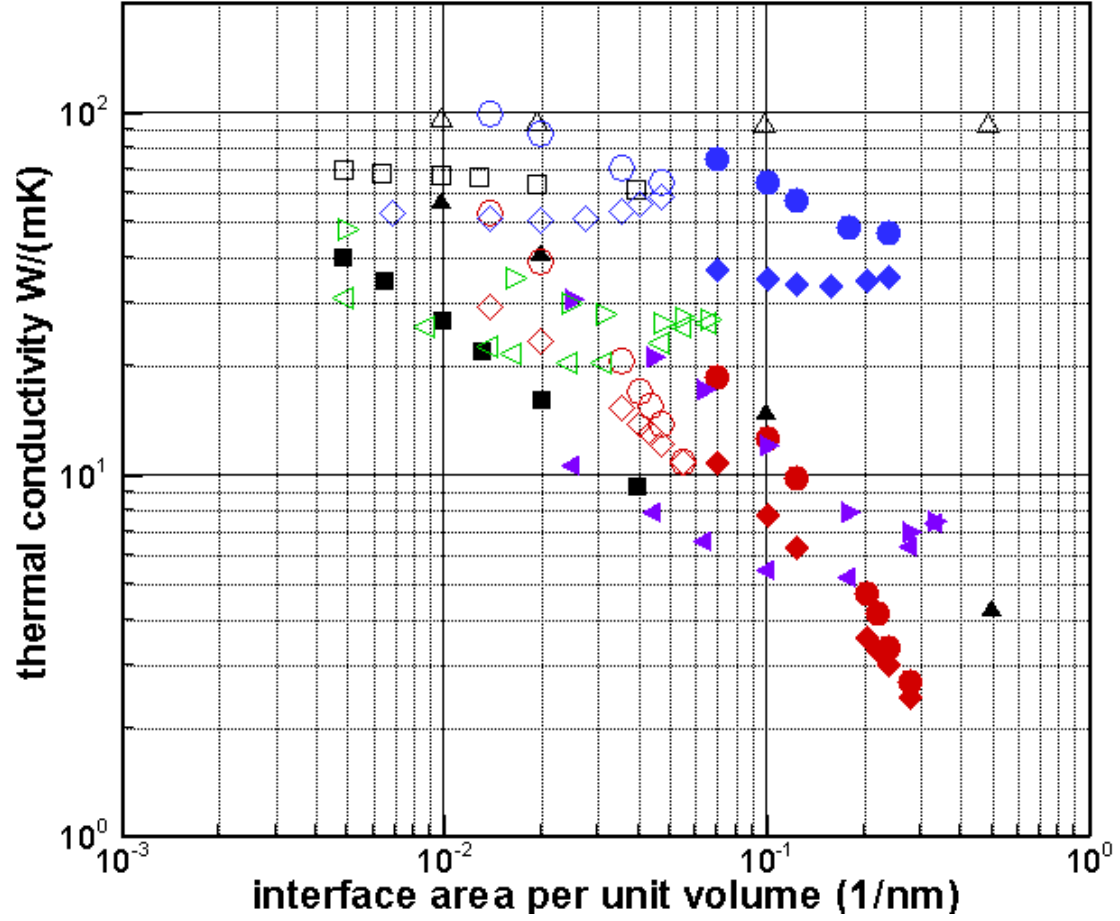
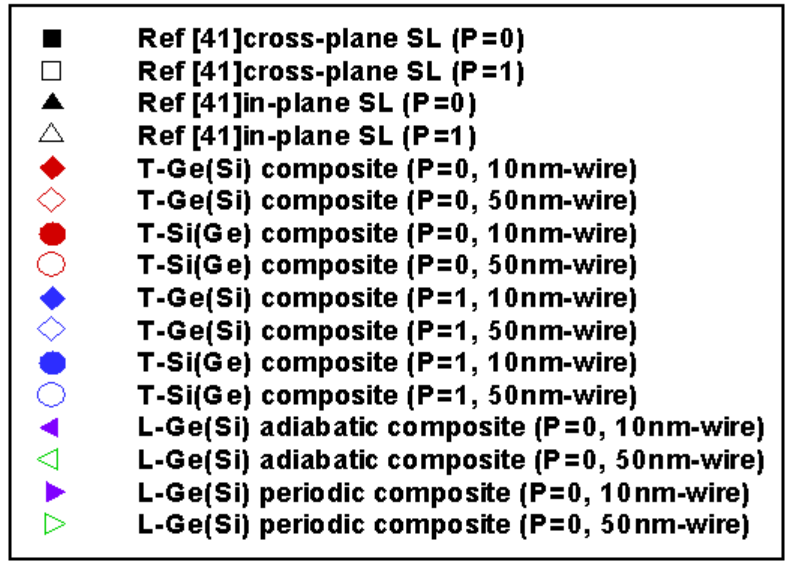


圖 5.1 矽-鍺奈米結構，熱傳導係數隨介面密度(單位體積的介面面積)之變化圖。其中 *T* 與 *L* 分別代表矽-鍺奈米線複合材料垂直與平行軸方向之熱傳。

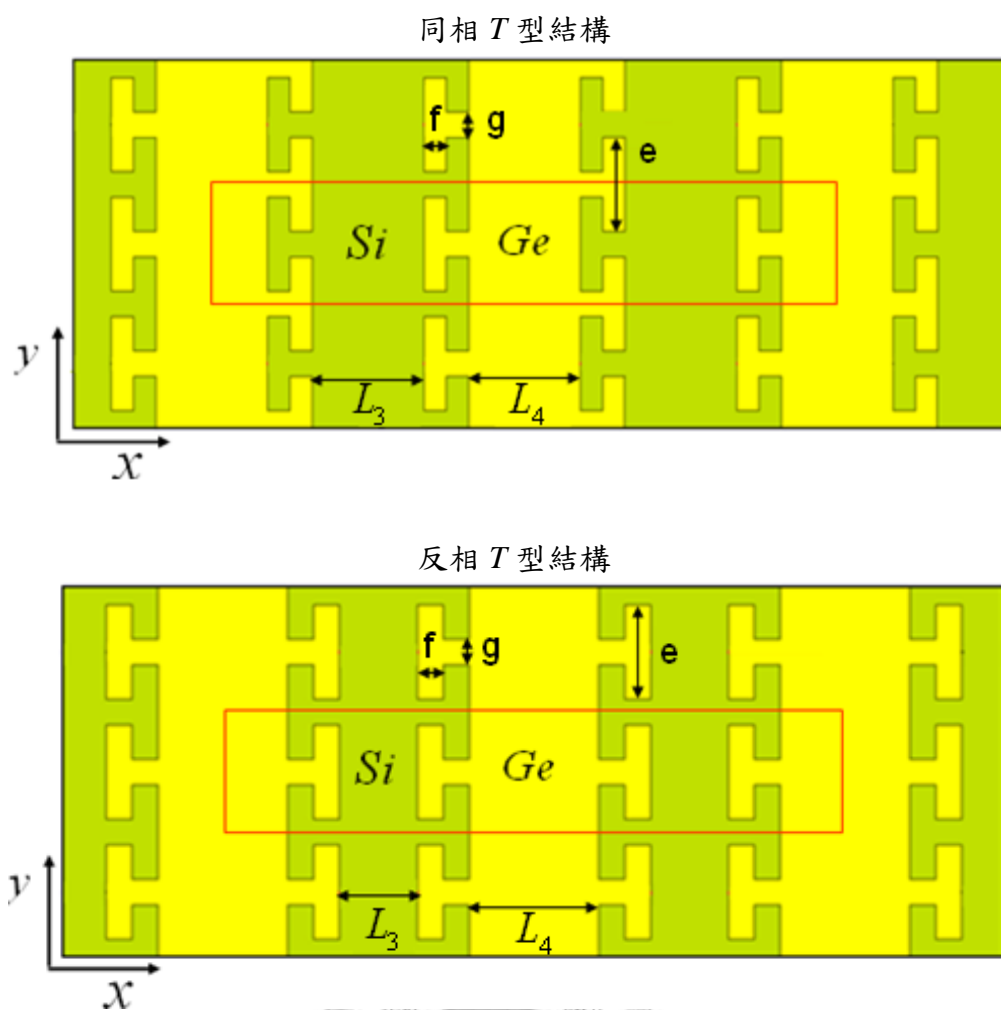


圖 5.2 加入 T 型結構之超晶格薄膜的模擬示意圖。上圖稱為同相 T 型結構，下圖為反相 T 型結構，目前模擬設定為 $L_3 = L_4$ ，且皆以圖中紅色區塊 (2×1) 個週期進行模擬。

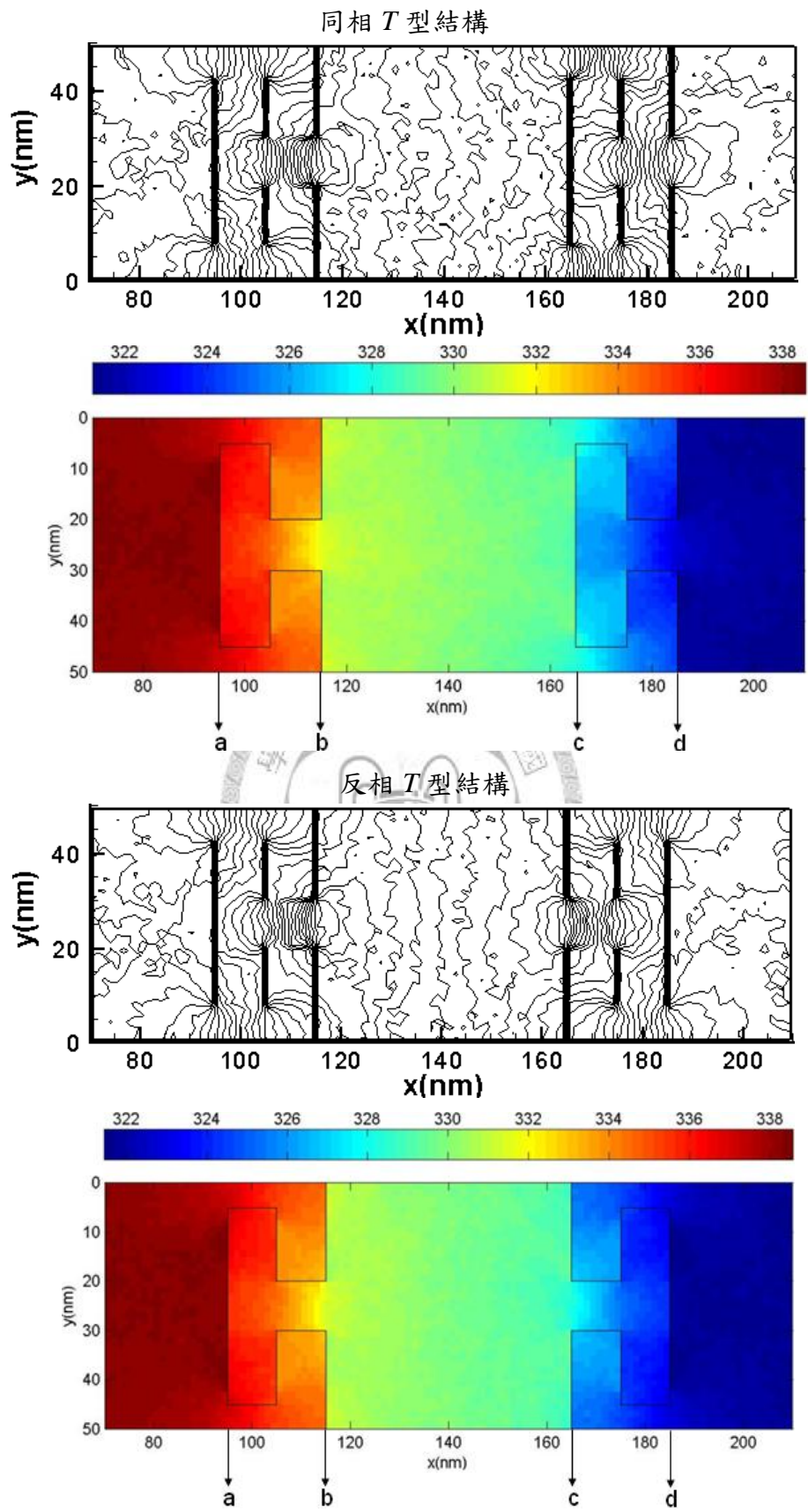


圖 5.3 模擬 2×1 週期之中間週期之穩態後的時間平均溫度分布圖；圖中間材料為鍺材，左右為矽材。

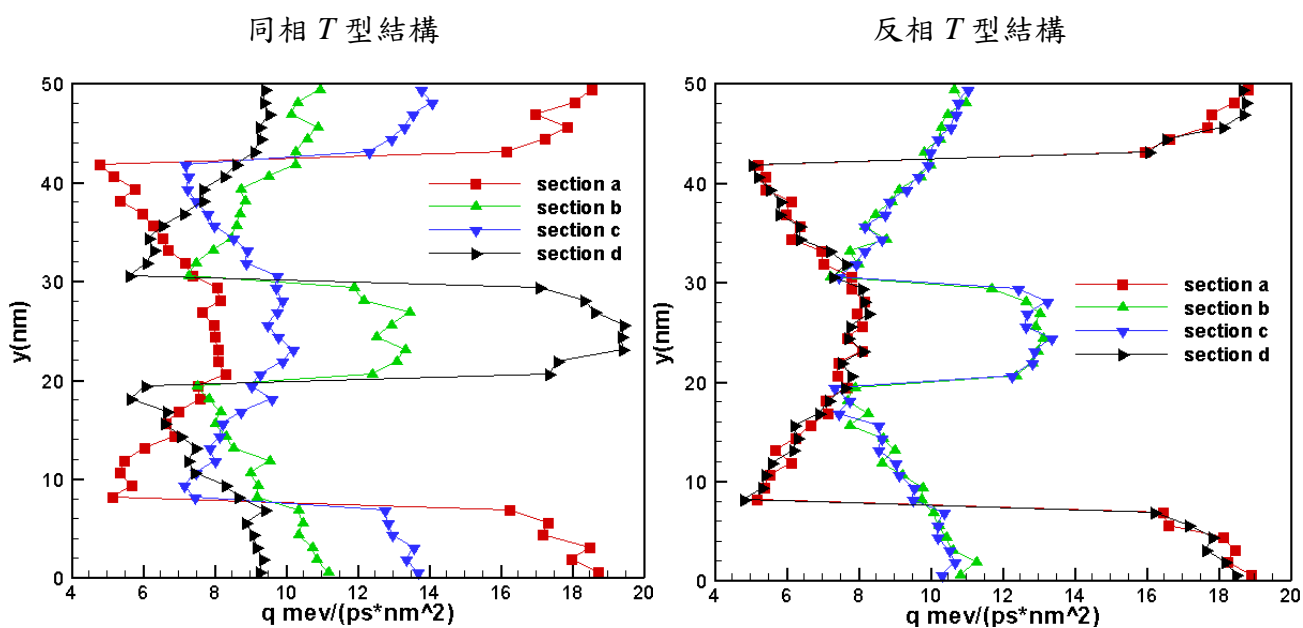


圖 5.4 x 方向四個截面之熱通量分布圖；截面 a、b、c、d 位置如圖 5.3 所示。

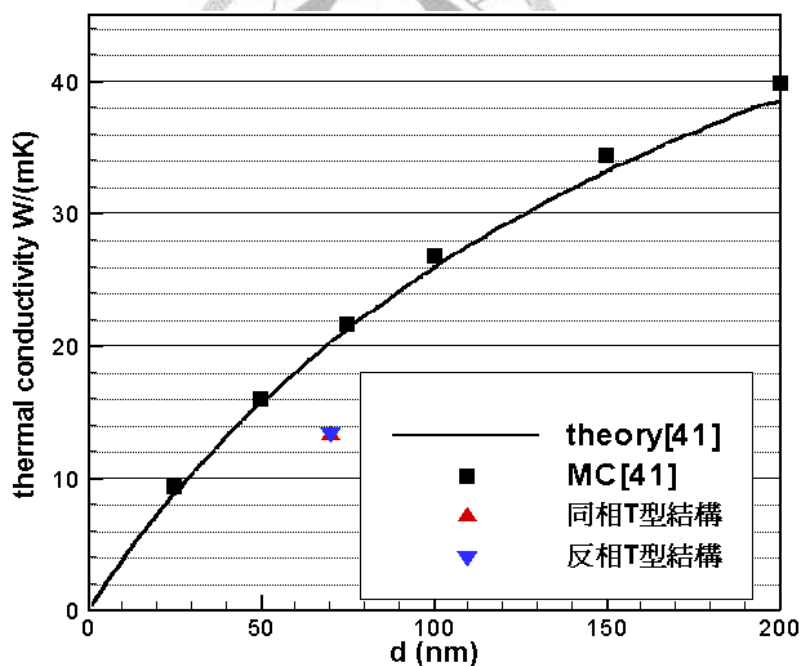


圖 5.5 加入 T 型結構之 Si/Ge 超晶格薄膜熱傳導係數與 $\text{Si}(d)/\text{Ge}(d)$, $P=0$, 垂直平面方向等效熱傳導係數隨超晶格週期($2d$)之變化圖[41]。