

國立臺灣大學工學院應用力學研究所

碩士論文

Graduate Institute of Applied Mechanics

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

使用聲子波茲曼方程對緊密型奈米尺度複合物之

熱傳模擬

Thermal Conductivity Modeling of Compacted
Nanocomposites Using Phonon Boltzmann Model Equation



Jen-Chieh Hsu

指導教授：楊照彥 博士

Advisor: Jaw-Yen Yang, Ph.D.

中華民國 97 年7月

July, 2008

誌謝

首先感謝楊照彥教授兩年的教導，讓學生得以口試畢業，再來感謝謝澤揚學長，在服役期間仍不嫌煩地每星期的指導解惑，在研究遇到瓶頸的時候，給予極大的協助，才能有此篇論文的產生。

在口試期間，感謝台大機械所王興華教授，中華技術學院洪榮泰助理教授，以及謝澤揚博士在百忙當中，撥空前來參與口試審查、指導及建議，在此獻上感激之意。

在應力所短暫兩年時間，感謝研究室博士班成員學長澤揚、育忻、國輝、立昕在研究及學習上的指導；以及同儕之間的相互砥礪學習，學會了很多做事的方法及處事態度。國輝、李元和、維周，感謝你們在碩班期間時在運動上的陪伴，讓我唸研究所時體力比大學時更好，而學弟們雖然相處時間不多，但是口試期間謝謝你們的協助，也謝謝你們時常替研究室帶來歡樂的氣氛。

在此，也感謝大學同窗士傑、義傑，謝謝你們在我初來乍到台北混亂之時，給予我很大的幫助，在課業遇到危機時，給我鼓勵，讓我在台北求學這段期間，不會感到寂寞。再來感謝璐珊，謝謝妳從大學研究所考試一路陪伴我到唸完碩班，這當中遇到了許多困難，多虧你陪我一一度過。

最後感謝我的家人，謝謝爸媽在我背後給予的極大支持及鼓勵，讓我心無旁鶩無後顧之憂，可以專心的研究，不辜負爸媽對我的期望，順利完成學業。

摘要

在巨觀尺度下，熱傳遵守傅立葉熱傳方程式。若尺度縮小到微奈米等級時，傅立葉熱傳方程式在分析模擬上會高估實際的物理量產生熱傳率。所以在微尺度下探討分析真實熱傳導，傅立葉熱傳方程已不適用。半導體或絕緣體材料中，熱是由熱載子(電子、聲子和光子)來傳遞的。在本文中，主要探討聲子在複合材料內的熱傳遞。

聲子輻射熱傳方程式為非線性且含有積分微分的多變數方程式，要直接求解並不容易，若將碰撞項用鬆弛時間近似成 BGK 方程式 (Bhatnagar-Gross-Krook Equation)來簡化，在數學上會較易處理，本文在方向上使用離散座標法(Discrete Ordinate Method)將方向餘弦離散化，在空間上使用迎風算則(Upwind Scheme)來分析問題。

奈米複合材料在超晶格(superlattice)中，被觀察到有類似熱導率減少及熱電效率增加的現象，這提供了奈米尺度效應在熱電材料中可增加益處的方向。奈米複合材料排列可分成兩種類型，一種為材料以奈米線的樣式嵌入在另一個主要的基質材料，稱為線型(nanowire)，另一種為像棋盤式的緊密混合兩種不同類型的奈米線，稱為緊密型(nanocompacted)。以相同的化學計量下，緊密型混合奈米線的複合材料，因為材料沒有連續相，熱傳導係數會低於將奈米線嵌入一主要基材的類型。

本文利用聲子輻射熱傳方程配分離座標法探討一維界面密度問題，以及二維線型(wire)及緊密型(compacted)的超晶格界面密度的比較，以及在不同溫度下，兩種類型的熱傳導率分佈情況。

最後再與先前論文中利用直接蒙地卡羅(DSMC)模擬的結果做誤差比較，以探討缺失。

關鍵字：微觀熱傳、聲子輻射傳輸方程式、離散座標法。

ABSTRACT

The equation of phonon radiative transfer (EPRT) is a nonlinear, integral, differential equation with many variables. It is difficult for us to solve the equation directly. If we simplify the relaxation time of collision term by Bhatnagar-Gross-Krook Equation. The equation will become easily to cope with. In this paper, we deal with phase space where the discrete ordinate method is used for angular discretization; and using upwind scheme the deal with spatial discretization.

Nanocomposites in superlattices are observed that may realize a similar thermal conductivity reduction and thermoelectric efficiency enhancements. So it provides us a way to increase the benefits of the nanoscale effects to thermoelectric materials in bulk form. If there are two species of nanocomposites, one is a material in the form of nanowires embedded in another host matrix material; the other is a discrete mixture of two different kinds of nanowires that are compacted. At the same stoichiometry, a nanocomposite in the form of discrete mixtures of nanowires does not have a continuous phase of material, so its thermal conductivity is lower than composites with nanowires embedded in a host material.

In this paper, using EPRT with the discrete ordinate method to investigate simulation about the density of interface of one dimension superlattice, nanocomposites of nanowires embedded in another host matrix material, and nanocomposites of compacted silicon and germanium nanowire mixtures nanocompacted.

Results show that the thermal conductivity of composites in the form of compacted silicon and germanium nanowire mixtures is lower than the composites with silicon nanowires embedded in a germanium matrix at the same atomic composition and characteristic size of the nanowires.

Finally, we will take our data to compare with the other study which simulation by Direct Monte Carlo Method.

Keywords: Equation of Phonon Radiative Transport, Discrete Ordinate Method, nanowires, nanocompacted.

目 錄

誌謝	I
中文摘要	II
英文摘要	III
目錄	IV
附表目錄	VI
附圖目錄	VII
符號說明	X
第一章 緒論	1
1.1 引言	1
1.2 微觀熱傳導	1
1.3 文獻回顧	4
1.4 研究內容	7
第二章 聲子輻射熱傳理論	11
2.1 Liouville 方程式	11
2.2 Boltzmann 方程式	13
2.3 鬆弛時間	13
2.3.1 缺陷散射	14
2.3.2 三聲子過程(Three Phonon Process)	15
2.3.3 等效鬆弛時間	16
2.3.4 灰體鬆弛時間	16
2.4 聲子輻射熱傳方程式	17
2.5 邊界條件	19
2.6 界面熱阻	21
2.6.1 聲異理論模式(AMM)	22

2.6.2 散異理論模式(DMM)	23
2.6.3 散射聲異理論模式(SMAMM)	24
2.7 射線效應(Ray Effect)	25
2.8 假散射(False Scattering)	26
第三章 數值方法	31
3.1 方向離散	31
3.1.1 離散座標法(Discrete Ordinate Method)	31
3.2 空間離散	32
3.2.1 迎風算則	32
3.2.2 雙曲線型守恆律算則	34
3.3 時間離散	35
3.3.1 Euler Method	35
3.3.2 隱式算則(Implicit Scheme)	35
3.4 無因次化	37
第四章 數值模擬結果與討論	40
4.1 薄膜超晶格結構	40
4.2 線型超晶格結構	42
4.3 緊密型超晶格結構	44
第五章 結論與建議	72
參考文獻	74

附表目錄

表1-1 熱載子的基本性質	8
表1-2 各種理論模式適用範圍表	8
表 3-1 300K~800K 矽/鍺薄膜材料的材料性質	38
表 4-1 DSMC 與 DOM 線型模擬 300K~800K 的數據比較	47
表 4-2 DSMC 與 DOM 線型模擬 300K~800K 的數據誤差比較	47
表 4-3 DSMC 與 DOM 緊密型模擬 300K~800K 的數據比較	48
表 4-4 DSMC 與 DOM 線型模擬 300K~800K 的數據誤差比較	48



附圖目錄

圖1-1	薄膜中聲子的熱傳導	9
圖1-2	聲子晶格2D振盪示意圖	9
圖1-3	聲子振盪3D示意圖	10
圖2-1	流線系綜(Ensemble)示意圖	27
圖2-2	空間立體角(Solid angle)示意圖	27
圖2-3	三聲子過程示意圖	28
圖2-4	邊界鏡面反射	28
圖2-5	邊界擴散反射	28
圖2-6	AMM界面示意圖	29
圖2-7	DMM界面示意圖	29
圖2-8	射線效應示意圖	30
圖2-9	假散射示意圖	30
圖3-1	迎風算則示意圖	38
圖3-2	數值方法流程圖	39
圖4-1	薄膜超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖	49
圖4-2	薄膜超晶格 ($L_{Si} = 1\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 格點收斂測試圖	50
圖4-3	鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 10\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 熱通量	51
圖4-4	鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 100\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 熱通量	52
圖4-5	鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 1000\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 熱通量	53
圖4-6	鍺/矽薄膜超晶格 ($L/L_{Si} = 2$) 等效熱傳導係數何尺寸關係圖	53

圖4-7 鍺/矽薄膜超晶格等效熱傳導係數和界面面積百分比關係.....	54
圖4-8 線型超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖	55
圖4-9 線型超晶格單位晶胞 (Unit cell) 邊界條件示意圖	55
圖4-10 線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 1\text{nm}$) 格點收斂測試圖	56
圖4-11 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 10\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x方向熱通量圖.....	57
圖4-12 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 100\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x方向熱通量圖.....	59
圖4-13 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 1000\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x方向熱通量圖.....	60
圖4-14 鍺/矽線型超晶格 $L = \sqrt{2} L_W$ 等效熱傳導係數與尺寸關係圖.....	61
圖4-15 鍺/矽線型超晶格等效熱傳導係數與表面積百分比關係圖.....	61
圖4-16 緊密型超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖	62
圖4-17 緊密型超晶格單位晶胞 (Unit cell) 邊界條件示意圖	62
圖 4-18 鍺/矽緊密型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 1\text{nm}$) 格點收斂測試圖..	63
圖 4-19 鍺/矽緊密型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 10\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量.....	64
圖4-20 鍺/矽緊密型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 100\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x方向熱通量.....	66
圖4-21 鍺/矽緊密型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 1000\text{nm}$) 穩態結果：(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x方向熱通量.....	67

圖 4-22 鍺/矽線型與緊密型超晶格在 300K, 500K, 800K 熱傳導係數關係圖	68
圖 4-23 鍺/矽線型在 300K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	68
圖 4-24 鍺/矽線型在 500K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	69
圖 4-25 鍺/矽線型在 800K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	69
圖 4-26 鍺/矽緊密型在 300K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	70
圖 4-27 鍺/矽緊密型在 500K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	70
圖 4-28 鍺/矽緊密型在 800K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖	71
圖 4-29 鍺/矽線型在 Ge 所佔不同比例下之使用 BTE 及 MC 計算與本文計算之熱傳導係數比較圖	71



符號說明

A	無因次常數
\bar{a}	粒子的加速度 [ms ⁻²]
$D(\omega)$	聲子態密度 [m ⁻³ s]
f	統計的分布函數
\hbar	普朗克常數除以 2π [Js]
I	方向的頻譜的聲子輻射能量強度 [Wm ⁻² sr ⁻¹ s]
k_B	波茲曼常數 [JK ⁻¹]
Λ	聲子平均自由路徑 [m]
L	薄膜厚度 [m]
\bar{n}	界面的單位法向量
q	熱通量 [Wm ⁻²]
R	晶格缺陷的半徑 [m]
\vec{r}	位置向量
\hat{s}	單位方向向量
t	時間 [s]
T	溫度 [K]
T_D	德拜溫度 [K]
U	聲子總能量
V	聲速 [ms ⁻¹]
\vec{v}	速度向量 [ms ⁻¹]
W	權函數
x	座標方向和長度 [m]



希臘字母

α	常數定義在(2-14)式
ψ	雜質密度[m ⁻³]
η	無因次吸收係數
κ_a	吸收係數 [m ⁻¹]
κ_s	散射係數 [m ⁻¹]
Λ	聲子平均自由路徑[m]
μ	方向餘弦
ξ	無因次x距離
τ	鬆弛時間或溫因次時間[s]
Ψ	散射截面[m ²]
Φ	相函數
χ	尺寸參數
ω	聲子角頻率 [s ⁻¹]
Ω	立體角[sr]
σ_p	聲子的史蒂芬-波茲曼常數 [Wm ⁻² K ⁻⁴]

上標

e 平衡狀態

下標

D 德拜截止

i 晶格缺陷

p 偏振



第一章 緒論

1.1 引言

近十幾年來，人類在傳統尺度上的物理現象及規律已有較充分的瞭解，因此科學及工業技術的發展開始朝向微型化邁進，將注意力著重於發生在微小尺度或快速過程中的現象及電子元件上，又隨著微機電系統、半導體產業及光電產業順利的蓬勃發展，小元件內及其快速的熱物理問題逐漸廣泛受到重視。隨著微型化的製作，不僅線寬縮小，材料在空間和時間上的尺度也縮小，材料的熱物理性質亦與巨觀的熱物理性質有所不同，在巨觀熱傳現象下所使用的 Fourier 熱傳導定律(Fourier Law of Heat Conduction)套用在極小尺度時已經不適用，所以微觀熱傳理論(Microscale Heat Transfer Theory)因而被發展提出。

1.2 微觀熱傳導

根據熱力學第二定律，在自然界中任何不可逆過程(Irreversibility Processing)的反應，其能量的耗散必有一部分是以熱的形式來表現，在化學反應或是相變態的過程中，任意分子的重新排列建構也會牽涉到與周遭環境能量交換界面的問題。

早期微尺度熱傳學的研究集中在解決熱傳導問題上，爾後再擴展到對流及輻射等問題。在微尺度下，熱導率與材料厚度有相依的關係，最先是由物理學家開始萌起。一九六〇年代後期，熱物理學家才開始注意到一系列元件中尺寸效應(Size Effect)對熱傳問題的影響，到了一九八〇年代末，這類問題研究進展更是迅速，於是微尺度熱傳學開始崛起。一切主因都與實際工程上的應用有著密切相關，例如：金屬薄膜和金屬奈米線應用的增加與需要以及低溫技術的迅速發展，Tien (1969) [31]在低溫下計算金屬薄膜和金屬線，發現其電導率及熱導率與巨觀下的對應值有所不同，其中原因之一是靠近元件表面的電子平均自由程(Mean Free Path)在邊界上會縮小，且電子平均自由程隨溫度的降低而增加，在低溫的狀態時，此情形更加明顯。如果熱載子的平均自由程與給定樣品的最小尺度在量級上相當時，則這些熱載子的運輸過程會表現出對樣品尺度的依賴性，稱之為尺寸效應(Size Effect)。

Fourier 定律最早是由 Biot 在實驗中觀察到的現象，之後由 Fourier 以數學形式表達出，並以其名字命名之。Fourier 定律是假設材料為連續介質，具有巨觀上連續意義的定義。從微觀角度研究熱導機制時，須由微觀考慮粒子運動所造成的熱量運輸(Heat Transport)，其中包括介質內部從高溫區向低溫區擴散時熱載子的運輸現象。由於熱傳導運輸機制涉及與大量的載子，在有限時間週期內的無規律運動，科學家認為熱載子的統計運動在比德拜(Debye)溫度還高的情況下，對熱傳導影響不大。Fourier 定律中熱傳導效應對鬆弛時間及特徵長度的範圍進行了定量化。Bai 和 Lavine (1993) [1]採用修正後雙曲線型熱傳導方程式來研究固體內的熱傳播，結果顯示對於層厚度在載子平均自由程(Mean Free Path)量級的平板，躍變邊界條件對熱傳導問題的求解有很大的影響，在此種條件下由雙曲線型熱傳導方程式求得的結果與傳統修正情況下的結果有很大的差異。在熱傳導問題分析上，傳統熱學(巨觀熱傳學)大多是採用 Fourier 定律，但是熱載子的具體運動則不在其考慮範圍之內。然而，當元件尺度小到次微米級之下時，從熱載子的微觀角度來探討傳熱過程就變得相當重要。

在半導體介電質材料中，熱主要是由材料中的晶格振盪(Lattice Vibration)來傳遞，晶格振盪可以視為一種三維彈簧振動系統，圖 1-3，與波的性質相同，都會有縱向偏振(Longitudinal Polarization)及橫向偏振(Transverse Polarization)，而聲子在物理上並不是實際存在的物質，它是由晶格振盪所產生的能量，經過量子化後，被定義為聲子(Kittle [15])，為一種虛擬的粒子，與電磁波被量子化後所產生的光子有相似的情形。量子化的能量可由彈性模式在不同頻率下所產生的能量來表示：

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (1-1)$$

其中， ω 為頻率， \hbar 為普朗克常數(Planck's Constant)除以 2π ， n 為第 n 個聲子所佔據。當 $n=0$ ， $E = \frac{1}{2} \hbar \omega$ 時，被稱為在振盪模式的零點能(Zero Point Energy)。

固體導熱和輻射傳熱的主要載子有：電子(Electron)、聲子(Phonon)及光子(Photon)。在金屬中，熱傳導主要靠自由電子傳遞；在絕緣體及半導體中，主要是由聲子來傳遞，但實際的情況是包含聲子-聲子、聲子-電子及電子-電子之間的交互作用。

巨觀尺度下，一般利用傅立葉定律來描述熱傳現象，關係式如下：

$$q = -K\nabla T \quad (1-2)$$

其中， q 為單位面積熱流(Heat Flux)， K 為熱導率(Thermal Conductivity)， T 為溫度(Temperature)，負號表示熱傳遞是沿著熱區往冷區的方向行進。此式套用在微小尺度下時，根據動力學理論(Kinetic Theory)，介質中的熱導係數跟材料的物理性質關係如下：

$$K = \frac{1}{3} C v \Lambda \quad (1-3)$$

其中， K 為材料熱傳導常數(Thermal Conductivity)， C 為比熱(Specific Heat)， v 為聲子的群速度(Group Velocity)， Λ 為聲子的平均自由徑(Mean Free Path)。

由固態物理理論，聲子的分布遵守 Bose-Einstein 統計，在學術研究中，若材料尺寸大於其物質波的波長時，可將之視為粒子，不用考慮其波的特性，所以可利用波茲曼(Boltzmann)方程來描述微觀尺度之聲子傳遞現象。

我們為了方便探討不同尺度，及其數學模式所適用的範圍，會引進 Knudsen Number(紐森數)來區分尺度情況。

$$Kn = \frac{\Lambda}{L} \quad (1-4)$$

其中， Kn 為平均自由程與特徵長度的比值， L 為材料實際特徵長度， Λ 為物質的平均自由程。Bird 依局部 Knudsen 數定義各主導方程式的適用範圍，如表 1-2 所示。

由圖 1-1 所示，特徵長度跟平均自由程的比較，隨著比率 $\frac{\Lambda}{d}$ 的增大，邊界散射效應變得很顯著，由於存在邊界效應，載子平均自由程小於其體材值，由式(1-3)粗略看出，熱導率將變小。當 $\Lambda \ll d$ 時，這種減小所帶來的效應可忽略，但是當 $\Lambda \approx d$ 及 $\Lambda > d$ 時，邊界散射的效應就必須考慮。基於上述的概念，Filk (1992) 等提出了劃分熱傳導區域的措施，如微尺度熱傳導區域可以定義為 $\frac{d}{\Lambda} < O(1)$ 或

$\frac{d_T}{\Lambda} < O(1)$ ，上述採用了一階誤差符號表示之。

由圖 1-1 可知，當 $\Lambda < d$ 成立時，熱載子的 Λ 除受到內部散射機制的影響外，還受限於邊界散射；當 $\Lambda > d$ 成立時，載子在一 Λ 內經歷大的溫度變化。在這種

情況下，能量傳輸變成非局域性，並且有效熱導率取決於溫度梯度，這樣的非局域輸運性很類似輻射性質中的反趨膚效應。聲子的輸運在 Λ 遠大於元件特徵尺度時是彈道型而非擴散型的。

微結構是由界面、邊界及顆粒邊界刻劃的，通常有兩種途徑能將這些關於導熱的效應考慮到 Boltzmann 方程式中，其中之一就是將它們考慮微體積效應，然後利用經驗定理，如：Mattiessen 定理或是透過量子力學理論將其結合在散射項中，另一種辦法是將其處理為邊界條件之後再進一步分析。

如果忽略了介質的微結構及尺度，則 Fourier 定律只在下述區域成立

$$\frac{L}{\Lambda} \gg O(1) \quad (1-5)$$

$$\frac{t}{\tau} \gg O(1) \quad (1-6)$$

$$T \gg 0 K \quad (1-7)$$

其中， L 為特徵物理尺寸， Λ 為熱載子平均自由程， t 為物理時間， τ 為熱載子平均鬆弛時間。(1-5)(1-6)(1-7)式分別代表尺度極大、時間極長、溫度過高。熱載子的平均自由程在微尺度熱傳導分析中是一個重要概念。

求解含有積分及微分的 Boltzmann 方程並不容易，但是可以根據不同的假設做簡化，若假設時間遠大於鬆弛時間，則通常做的簡化是不討論時間變化量；若假設特徵長度遠大於平均自由徑，則梯度項可近似為沿 x 方向的一維 Boltzmann 方程，該式稱為準平衡假設，其中唯一包含非平衡的項為散射項。

聲子在絕緣材料中的散射機制主要可分成兩類：(1)由於晶格缺陷而產生的彈性散射，如：缺陷、錯位和邊界...等，聲子散射前後的能量或頻率不會發生任何變化；(2)聲子-聲子間的非彈性散射，通常三個或三個以上的聲子彼此發生散射，頻率會發生變化。缺陷散射灰體(Gray)模型為簡化問題，通常假設鬆弛時間與頻率無關，即為灰體模型。

1.3 文獻回顧

在一九九0年代，一系列有關微熱傳的研究開始萌芽，如Flik [11]及Chen 與 Tien [8]和Majumdar [17]等人進行的一系列研究，顯示Fourier定律在分析高溫超導薄膜及介電質薄膜在一定溫度和厚度區域內的熱傳導問題時，已經不再適用。

在熱傳導方面，Duncan 及 Peterson (1994)；Kumar 和 Vradis (1991)利用 Boltzmann 方程式，求解層厚在能量載子平均自由程量級上的薄膜，發現膜邊界的散射是決定熱量傳遞的主要機制，薄膜電導率和熱導率隨尺寸的減小機制在許多情況下是相同的，利用 Boltzmann 方程式再作進一步分析可以對薄膜運輸特性的有更深認識。Filk (1992)發展出一個用已定義的熱傳導，定義是否處於巨觀或是微觀區域，因此可得出這樣的結論，材料的純度及缺陷結構強烈地影響熱傳導的一些相關運輸性質鬆弛時間。Vedavarz (1991)也考慮到了這些現象，並對一定加熱條件下，可能引起非 Fourier 定律熱傳導效應的鬆弛時間及特徵長度的範圍進行定量化。

Bai 和 Lavine [1]採用修正後的雙曲線型熱傳導方程式來研究固體內的熱量傳播，結果顯示層厚在載子平均自由程量級的平板，躍變邊界條件對熱傳導問題的求解有很大的影響，此條件下由雙曲線型熱傳導方程式求得的結論與傳統修正情況下的結果差異甚大。

Boltzmann 方程式在這方面是被認為是一種最具普遍適性和有效的工具，於是 Majumdar [17]發展了一個基於 Boltzmann 理論的聲子輻射運輸方程式 (Equation of Phonon Radiative Transport, EPRT)，用以分析單個薄膜中的熱導問題。許多研究顯示：在微尺度區域內，晶格振動或聲子的熱傳導表現是以輻射熱傳的形式，而非傳統巨觀的擴散熱傳形式。

Little [16]發展出聲異理論模式 (Acoustic Mismatch Model, AMM) 預測在極低溫下兩固體界面間之溫差，此理論假設所有聲子與界面之相互作用皆為鏡面散射 (Specular Scattering)，即不考慮擴散散射 (Diffuse Scattering) 的效應，在低溫情況下此種假設為合理假設，因為聲子波長遠大於界面粗糙度，但隨溫度增加，聲子的波長會逐漸變小，這種假設就不再適用，為了克服該問題，Swartz 與 Pohl [28]提出了散異理論模式 (Diffuse Mismatch Model, DMM)，此理論是假設所有聲子與界面之相互作用皆為擴散散射，即不考慮鏡面散射效應。

Majumdar [17]首先利用聲子 Boltzmann 方程分析鑽石薄膜熱傳問題，結果顯示在微尺寸下，聲子熱傳不可視為連續體，亦無法建立起區域溫度梯度，若是使用 Fourier 定律，則會高估薄膜之熱通量。

Phelan [22]利用聲異模式 (AMM) 與散異模式 (DMM) 來預估高溫超導薄膜的界面熱阻，結果顯示由散異模式 (DMM) 得到的界面熱阻較接近實驗數據。

Chen 與 Tien [8]使用 DMM 分析 GaAs 與基材間之界面熱阻，結果顯示聲子穿透率越高，則熱傳導係數會越高。Chen [3]利用聲子 Boltzmann 方程分析週期薄膜結構在其平行方向(In-plane)之熱導率，並考慮不同之界面邊界條件，發現界面粗糙度是導致熱導率下降的主因。Chen [4]利用聲子 Boltzmann 方程分析週期薄膜結構在其垂直方向(Cross-plane)的熱導率，提出非彈性界面條件，比較彈性和非彈性的界面條件差異，發現垂直方向的熱傳導率幾乎與鬆弛時間無關，使用灰體模型(Gray model)即可得到良好的結果。

Prasher 與 Phelan [23]修正 AMM 並提出了 SMAMM (Scattering Mediated Acoustic Mismatch Model)。Chen 與 Zeng [35]對 Little [16]提出的 AMM 以及 Swartz [27]提出的 DMM 修正，提出非彈性 AMM 與非彈性 DMM，結果顯示考慮到非彈性之散射行為時，界面熱阻會降低故熱傳導係數會變大。Chen [6]提出穿透擴散方程 BDE (Ballistic Diffusive Equation)，取代 BTE (Boltzmann Transport Equation)在為尺度熱傳的問題，結果顯示在微空間及時間尺度下，BDE 可以得到與 BTE 相符的結果。Muthy [19]以非結構網格解聲子 BTE。

Chen 與 Neagu [9]探討矽/鍺雙層薄膜和週期性結構，指出當超晶格厚度小於臨界值，等效熱傳導係數會因界面散射機制不同而受影響，得知鏡面散射的影響最小，擴散散射的影響最大；而當厚度大於臨界值，晶格錯位(Dislocation)為超晶格中最主要的散射機制，故可知界面粗糙度對熱傳導有很大之影響。

Yang 與 Chen [32]分析週期矽/鍺奈米線(Nanowire)結構，發現鍺原子數比在 0.8 時，等效熱傳係數與週期薄膜結構比較並無明顯降低，這是由於垂直與平行散射的幾何因素所造成；在微尺度下，出現內部溫度高於邊界溫度之特殊現象，熱通量亦異於一般情況；經過調整原子數量百分比後，發現線型的超晶格確實能增加聲子散射，得到較一維薄膜超晶格低的等效熱傳導係數；文中指出在微尺度時，鍺原子數量比越低則等效熱傳導係數越低，這是非常不同於傳統複合材料的現象，顯示在微尺度下界面散射的重要性，於其主要原因為矽之熱傳導性質較佳。

Narumanchi et al. [20]在聲子 BTE 問題中考慮了聲子的色散關係(Dispersion relation)與極化方向(Polarization)，並考量不同分支與頻率間聲子的交互作用，成功預測矽塊材與矽薄膜平面方向的熱傳導係數與溫度之關係。Yang et al. [33]

利用 BTE 來分析週期性圓管之熱傳現象，研究顯示在圓管中若含有孔隙將會造成更多的聲子散射，將比圓管有較低的熱傳導係數。Yang 與 Chen [34]利用 BDE 與 BTE 比較 CMOS 元件的溫升，發現 BDE 在內不無熱源情況下之結果會與 BTE 較符合。Tian & Yang [29]使用直接蒙地卡羅法(Direct simulation Monte Carlo method, DSMC)分析矽/鍺緊密堆積的複合材料，發現在相同化學計量比例下，等效熱傳導係數會比線型超晶格降低約一半，這是緊密堆積的複合材料的界面作用造成更多的阻礙，且區域升溫情況亦不復見。

1.4 研究內容

本文第一章內容先從微觀角度出發，簡單介紹微觀熱傳的發展及突破進展。並介紹了在電子元件中主要的三種熱載子，及其特性和熱傳遞的機制。接著利用文獻回顧來介紹本文的研究主題。

第二章介紹由古典力學推導得到 Liouville 方程，並將複雜的多粒子系統簡化為等效的單一粒子進行二元碰撞，然後又簡化獲得 Boltzmann 方程式。接著以波茲曼方程式為基礎，引進鬆弛時間近似，將聲子類比光子輻射方程式推導出聲子輻射傳輸方程式(EPRT)。然後對聲子傳遞所發生的散射機制以及邊界條件做簡介。再針對界面熱阻，介紹分析界面熱阻的理論方法，包括含聲異理論模式、散異理論模式、界面層理論模式，以及間接散射聲異理論模式並比較其差異性。由於聲異理論模式(AMM)僅適用在較低溫的情況下，故在本文中皆使用散異理論模式(DMM)來分析界面熱阻的影響，探討尺寸改變對於熱傳導現象與界面熱阻大小所產生的效應。

第三章介紹了一些本文所用到的數值方法；方向上則採用分離座標法(DOM)。利用離散座標法將 EPRT 轉變成一組具雙曲型偏微分方程式，之後分別對時間、空間離散，進行模擬分析。

第四章利用 EPRT 搭配離散座標法(Discrete Ordinate Method)，並套用迎風算則來進行分析，以求得問題的數值通量。先以一維超晶格(superlattice)薄膜模型來探討界面密度的影響，再探討二維鍺/矽線型(nanowire)超晶格結構及二維鍺/矽緊密型(nanocompacted)超晶格結構的界面密度所造成的不同熱傳導情形。

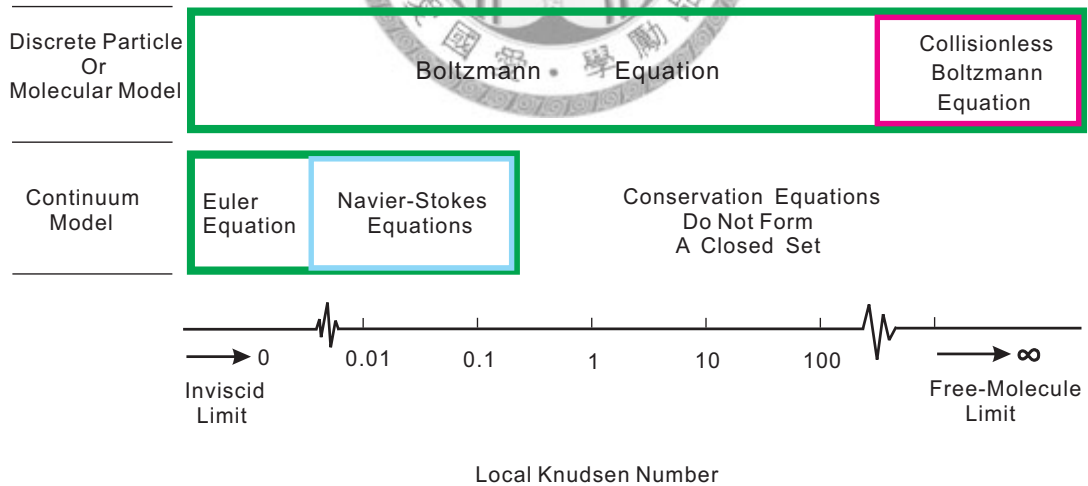
最後第五章提出本文的缺點，以及未來可以改進及繼續研究的方向。

表 1-1 熱載子的基本性質

	Free Electron	Phonon	Photon
Generation	Ionization or Excitation	Lattice Vibration	Atomic ,Molecule Transition
Propagation Media	Vacuum or Media	Media only	Vacuum or Media
Statistics	Fermion	Boson	Boson
Frequency	Zero ~ Infinite	Debye cut-off	Zero ~ Infinite
Dispersion	$E = (\hbar q)^2 / 2m$	$E = E(q)$	$v = c / \lambda$
Velocity	$\sim 10^6$	$\sim 10^3$	$\sim 10^8$



表 1-2 各種理論模式適用範圍表



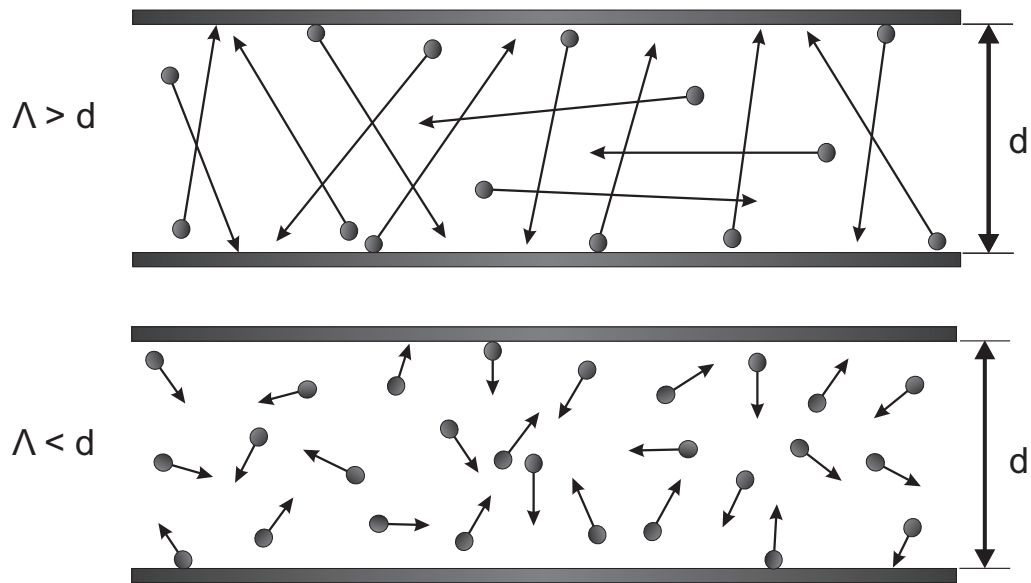


圖 1-1 薄膜中聲子的熱傳導

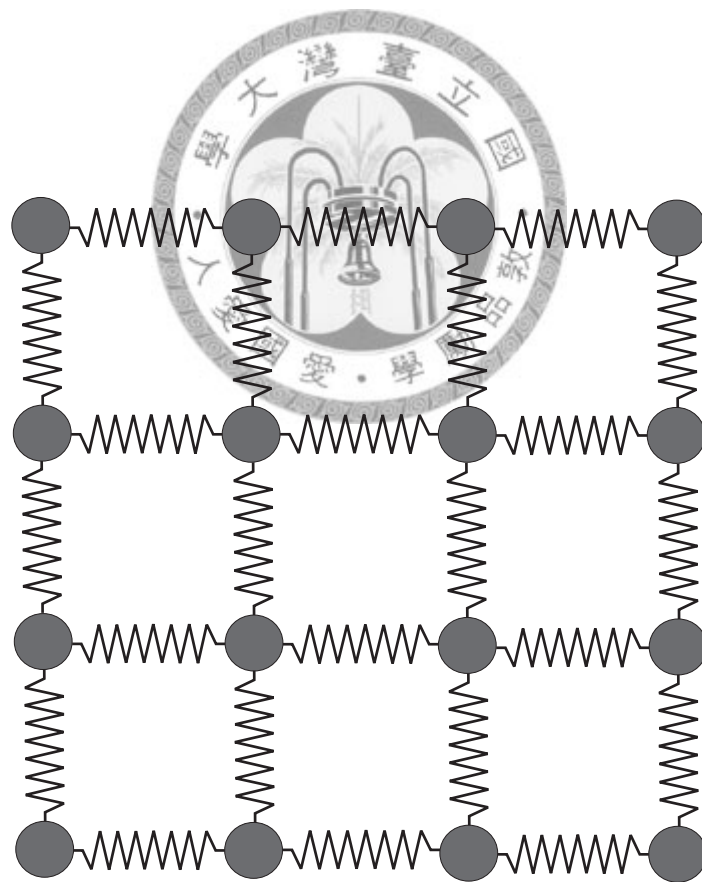


圖 1-2 聲子晶格 2D 振盪示意圖

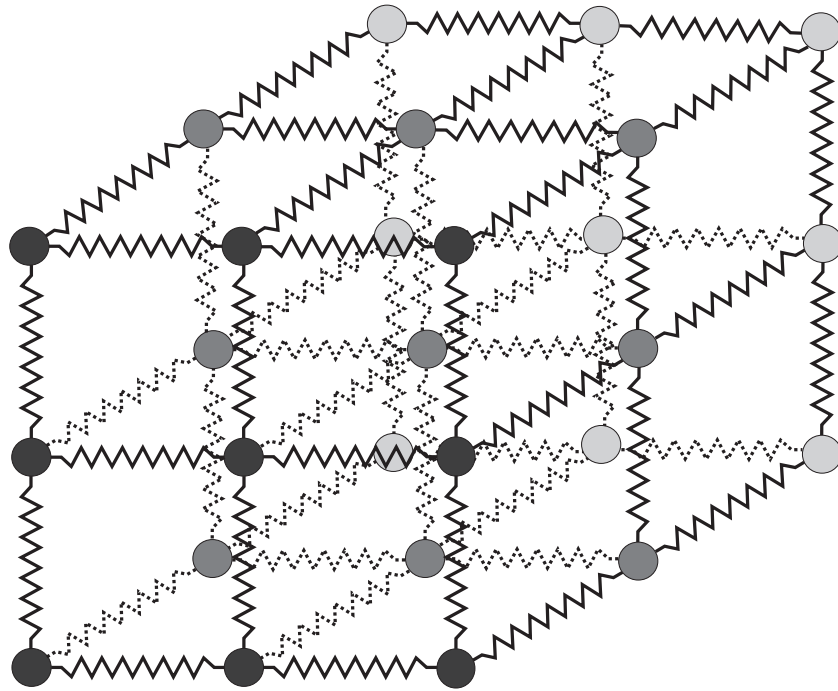


圖 1-3 聲子振盪 3D 示意圖



第二章 聲子輻射熱傳理論

氣體動力論(Kinetic Theory of Gas)源自於十七世紀時期，首先由 J. C. Maxwell 於 1859 年提出分子速度分佈函數的概念，藉著分子速度分佈函數以及平均自由徑的觀念，得到氣體的傳輸係數(Transport Coefficient)，如：熱傳導係數 (Thermal Conductivity Coefficient)、黏滯係數(Viscosity Coefficient)...等。1872 年 L. Boltzmann 提出以分子撞擊理論，求得分子速度分佈函數定律，並提出以一速度分佈函數為主要變數的積微分方程式，即為波茲曼方程式(Boltzmann equation)。1880 年 L. Boltzmann 又提出，在平衡狀態下，波茲曼方程式可以被直接求解的條件。

假設某種氣體是由無數個獨立分子所組成，其巨觀現象整體行為是由各分子的運動與碰撞所產生出來的，所以分子的平均自由徑(Mean Free Path, MFP)與碰撞頻率(Collision Frequency)為表現此行為的重要參數，其中平均自由徑的定義為分子產生碰撞所需移動的平均距離；碰撞頻率的定義為分子在單位時間內所碰撞的次數，兩者可以作為判斷流場稀薄程度的依據。通常會採用 Knudsen Number (Kn)，其定義為平均自由徑與流場特徵長度的比值

$$Kn = \frac{\Lambda}{L} \quad (2-1)$$

隨著不同 Kn，流場會表現出不同特性。當 Kn 趨近於無限大時，流場可視為分子無碰撞極限(Collisionless Limit)模型，即分子視為自由分子流；當 Kn 趨近零時，則流場可視為連體模型且為尤拉極限(Euler Limit)或無黏性極限(Inviscid Limit)模型。

2.1 Liouville 方程式

討論 MD (Molecular Dynamic)時，對於定溫、定壓下的系綜(Ensemble)，必須利用推導出來的 Liouville equation 來做討論分析。引進相空間(Phase Space)的概念，描述在保守赫米爾頓系統(Hamiltonian system)中，相空間分布函數(Phase Space Distribution Function)的演化過程。本質上，對通量而言是個連續方程(Continuity Equation)。

考慮相空間中含有 N 個分子的運動行為，各分子皆可以用廣義位置與動量

來描述，故系統內的狀態 N 個分子有 $6N$ 個維度(每個分子在直角座標上有 x, y, z 三個方向，每個方向上有位置 r_i 與動量 p_i ， $3N \times 2$)相空間的座標來表達

$$(r_1, r_2, \dots, r_{3N}, p_1, p_2, \dots, p_{3N}) \quad (2-2)$$

現在考慮此系統之系綜，即滿足某巨觀限制條件的集合，系綜裡面包含了相空間中的點，如圖 2-1 所示，我們藉由古典力學(Classical Mechanics)可知，由一起始條件出發系統隨著時間在相空間中移動的軌跡是可以唯一來求得的，由於在同一系綜內各系統點的起始條件皆不一樣，因此各系統點的軌跡亦不會相交(無碰撞)，所以在相空間中的流線不會相交，代表著系綜將會守恆。

系綜裡面的系統數目通常非常龐大，遠比系統內粒子數目還多。在一系綜裡，系統數可視為在巨觀下所看到的微觀狀態，就像是在巨觀尺度下的真實世界裡，將原子與分子群視為連續體，所以將這些微觀正則狀態(Micro canonical state)視為相空間中的連續函數，其中可定義粒子密度 $f^{(N)}$ 為在相空間點上的系統密度，故在相空間中單位體積內的系統數為

$$\text{Number of systems} = f^{(N)}(\bar{r}^{(N)}, \bar{p}^{(N)}, t) d\bar{r}^{(N)} d\bar{p}^{(N)} \quad (2-3)$$

系統中的 Hamiltonian 函數則可表示為

$$H(r_1, r_2, \dots, r_{3N}, p_1, p_2, \dots, p_{3N}) \quad (2-4)$$

在相空間中 N 粒子的分布函數 $f^{(N)}$ 隨著時間的演化為

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \dot{r}_i \frac{\partial f^{(N)}}{\partial r_i} + \sum_{i=1}^{3N} \dot{p}_i \frac{\partial f^{(N)}}{\partial p_i} = 0 \quad (2-5)$$

利用 Hamilton 方程

$$\begin{cases} \dot{r}_i = H_{,p_i} \\ \dot{p}_i = -H_{,r_i} \end{cases} \quad (2-6)$$

可得到 Liouville 方程式

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial r_i} - \sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial p_i} = 0 \quad (2-7)$$

上式表達了分佈函數 $f^{(N)}$ 隨著時間演化的行為，也明確描述了古典系統。但是要直接解 Liouville 方程式是很難辦到的，因為太多龐大的變數在裡面，且每個系統點的精確初始條件必須給定。雖然如此，Liouville 方程式卻也提供了一個好的出發點。

2.2 Boltzmann 方程式

一般來說， N 個分子的起始條件不容易給定，且在相空間中具有 $6N+1$ 個變數 ($3N$ 個位置、 $3N$ 動量和時間)，還須考慮邊界條件的設定，全部整合起來其數值解和正確解無法真正的被求解出。因此忽略各粒子之間的詳細行為，而著重於其整體巨觀行為。故將 N 個粒子的分佈函數簡化為單一粒子的分佈函數

$$f^{(1)}(\bar{r}_1, \bar{p}_1, t) = \frac{N!}{(N-1)!} \int \cdots \int f^{(N)} d\bar{r}_2 \cdots d\bar{r}_N d\bar{p}_2 \cdots d\bar{p}_N \quad (2-8)$$

而其在相空間中，單位體積內的系統數為

$$\text{Number of systems} = f^{(1)} d\bar{r} d\bar{p} \quad (2-9)$$

經過處理後的式子，大大地簡化了變數的數目。將單一粒子分布函數視為多粒子分布函數的投影，但此簡化成立的條件是必須為稀薄氣體才可行，且碰撞項部分僅考慮二元碰撞的情況。利用簡化過後的單粒子分佈函數，可以由 Liouville 方程式獲得 Boltzmann 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{r}}) f + (\bar{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{v}}) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C \quad (2-10)$$

其中碰撞項可表示為

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} (f_1^* f_2^* - f_1 f_2) v_r \sigma d\Omega dv_2 \quad (2-11)$$

若考慮在晶格中載子的傳輸行為時，Boltzmann 方程式通常以波向量 (Wave Vector) 的形式表達

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{r}}) f + \left(\frac{\bar{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{k}} \right) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C \quad (2-12)$$

其中 \bar{k} 為波向量， \hbar 為普朗克常數除以 2π ， $\bar{p} = m\bar{v}$ 、 $\bar{p} = \hbar\bar{k}$ ， \bar{p} 為動量。

2.3 鬆弛時間

Boltzmann 方程式為一個含有七個維度的積分微分方程式，其碰撞項 $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C$

在物理上，表示粒子之間的碰撞情形，此機制相當複雜，須考慮其散射機制、材料性質以及與電子之間的相互作用；在數學解析上，此碰撞項積分很複雜難解且

為非線性項。通常會利用鬆弛時間 (Relaxation Time, τ) 來近似，將碰撞項線性化成平衡分佈函數的偏離量，即利用局部非平衡分佈函數與平衡狀態分佈函數的差量來線性化，此種模型稱作 Bhatnagar Gross Krook (BGK) 模型，BGK 方程式為

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \frac{f^e - f}{\tau} \quad (2-13)$$

鬆弛時間的近似簡化了複雜的散射項。而如何決定鬆弛時間是一個重要的關鍵。考慮不同的散射機制，求得的鬆弛時間也不一樣。

聲子在材料中的散射機制主要為兩類：(1) 由晶格缺陷而產生的彈性散射，如缺陷、錯位和邊界...等，在散射的前後，聲子的能量或頻率不會發生任何變化；(2) 聲子與聲子間的非彈性散射，三個或三個以上的聲子彼此發生散射，則頻率會產生變化。

2.3.1 缺陷散射

缺陷散射為限制平均自由路徑之重要因素，聲子的散射必須考慮晶體的邊界、天然化學元素的同位素質量分布、化學雜質、晶格缺陷、以及非晶態結構，這些都會影響到材料裡面內部的實際幾何情形。

缺陷所造成的鬆弛時間為

$$\tau_i = \frac{1}{\alpha \phi \psi v} \quad (2-14)$$

其中 α 為一單位化常數、 ϕ 為散射截面， ψ 為缺陷密度，意指單位體積中會發生散射位置的數目、 v 為聲子速度。

散射截面 ϕ 可以利用 Rayleigh law (1896) 來求得

$$\phi = \pi R^2 \left(\frac{\chi^4}{\chi^4 + 1} \right) \quad (2-15)$$

其中 R 為晶格缺陷的半徑， χ 是尺寸參數 (Size Parameter)，可由聲子的波長求得

$$\chi = \frac{2\pi R}{\Lambda} = \frac{\omega R}{v} \quad (2-16)$$

2.3.2 三聲子過程(Three Phonon Process)

三聲子過程是由晶體位能之三次方項造成，一個聲子的存在會導致週期性的彈性應變，使得晶體的彈性常數在空間和時間上會產生變化，因此第二個聲子將受到彈性常數之變化而被散射出去，產生第三個聲子。

(1) 正常過程(Normal Process)

正常過程(Normal Process)或稱為 N 過程，此過程不會建立起熱平衡，其原因為在碰撞過程中聲子氣體之總動量守恆，在溫度 T 時，聲子之平均分布會因飄移速度而沿晶體移動，其飄移速度不會受其擾動，故不會有熱阻(Thermal Resistance)存在。

(2) 倒逆過程(Umklapp Process)

倒逆過程(Umklapp Process)或稱為 U 過程，此過程會造成熱阻(Thermal Resistance)，三聲子過程之 K 並不具有守恆形式 $K_1+K_2=K_3$ ，而是具有下列形式 $K_1+K_2=K_3+G$ ，其中 G 為倒晶格向量(Reciprocal Lattice Vector)，此過程由 Peierls 所發現。對聲子而言，只有在第一布里淵區(Brillouin Zone)內的 K 才有意義，任一碰撞後，若產生較長的 K ，必須加上一個 G 以回到第一布里淵區內，對於 $G \neq 0$ 的過程稱為倒逆過程。如圖 2-3 所示，若有兩個都是負的 K_x 聲子碰撞後，有可能因倒逆過程而造成一個正的 K_x 聲子。這些過程在週期性晶格內常可能發生。

U 過程的鬆弛時間為

$$\tau_U = A \frac{T}{\theta_D \omega} \exp\left(\frac{\theta_D}{\gamma T}\right) \quad (2-17)$$

其中 A 為一無因次常數與結構因子和倒逆過程的平均自由徑(MFP)有關， θ_D 為德拜溫度(Debye Temperature)， γ 為晶格結構參數。

2.3.3 等效鬆弛時間

利用 Matthiessen 法則可得各種散射過程之等效鬆弛時間，當每種散射由一單獨的鬆弛時間 τ_i 定義時，則等效鬆弛時間為

$$\frac{1}{\tau_{Total}} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots \quad (2-18)$$

或
$$\tau_{Total}^{-1} = \sum \tau_i^{-1} \quad (2-19)$$

Mattiessen 法則在不知道其他充分資訊的情況時，是一種非常有用的一階近似。可以用於分析其他散射機制如：電子與電子、電子與聲子及跟雜質間的散射或者是三種散射也或者是兩種不同的雜質散射。當幾種不同的散射過程，同時發生時，如：電子同時受聲子及雜質(電洞、差排及錯排等)的散射時，Mattiessen 法則指出，固體電阻是由各種單獨的散射引起電阻之合。鬆弛時間的總合效應也有類似的關係存在。

2.3.4 灰體鬆弛時間

由氣體運動理論可推導得熱傳導係數為

$$k = \frac{1}{3} C v \Lambda \quad (2-20)$$

其中 k 為材料塊材(Bulk)之熱傳導係數; C 為材料比熱; v 為材料聲速; Λ 為聲子平均自由徑。

由(2-20)可估計聲子的平均自由徑，並求得其鬆弛時間

$$\tau = \frac{\Lambda}{v} \quad (2-21)$$

一般而言，光頻支的聲子對於熱傳導的影響很小，幾乎沒有貢獻，通常會將光頻的聲子之比熱排除在估計之外，並以 sine 函數近似聲頻支之聲子的耗散關係

$$\omega_p = \omega_{mp} \sin \left[\frac{ka}{2} \right] \quad (2-22)$$

其中 k 為波向量、 ω_p 為極化方向 p 之聲子角頻率、 ω_{mp} 為極化方向 p 之聲子在第

一布里淵區邊界的角頻率、 a 為等效原子間距。

聲子的群速 (Group velocity) 和比熱可表達為

$$v_p[\omega] = \frac{\omega_{mp} a}{2} \cos\left[\frac{ka}{2}\right] \quad (2-23)$$

$$C_p[\omega] = \frac{4\hbar^2}{\pi^2 k_B a^3 T^2 \omega_{mp}} \frac{\left(\sin^{-1}\left[\frac{\omega}{\omega_{mp}}\right]\right)^2}{\cos\left[\frac{ka}{2}\right]} \frac{\omega^2 \exp\left[\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right]}{\left(\exp\left[\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right] - 1\right)^2} \quad (2-24)$$

再利用下列公式

$$k = \Lambda \sum_p \int_0^{\omega_{mp}} C_p[\omega] v_p[\omega] d\omega / 3 \quad (2-25)$$

可得較準確之值，此即為 Dispersion 模式，而(2-21)之鬆弛時間稱為 Debye 模式。

2.4 聲子輻射熱傳方程式(EPRT)

Majumdar 在 1993 年將聲子類比光子，以波茲曼傳輸方程式為基礎，推導出聲子輻射傳輸方程式 (Equation of Phonon Radiative Transfer, EPRT)。而聲子在介質中之傳遞速度接近為定值，故 Boltzmann 方程式(2-13)式中，加速度項可省略，方程可表示為

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = \frac{f^e - f}{\tau(\omega, T)} \quad (2-26)$$

聲子平衡分佈函數 f^e 為 Bose-Einstein 分佈

$$f^e(\omega, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad (2-27)$$

向量 \hbar 為普朗克常數 h (Planck's constant) 除以 2π ，以頻率分佈函數可表示為

$$\frac{\partial f_\omega}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_\omega = \frac{f_\omega^e - f_\omega}{\tau_\omega} \quad (2-28)$$

將聲子類比成光子，可以定義出在每單位頻率下聲子的能量強度 (Intensity)

$$I_\omega(\vec{r}, \theta, \phi, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_p \vec{v}(\theta, \phi) f_\omega(\vec{r}, t) \hbar \omega D(\omega) \quad (2-29)$$

其中 $\hbar\omega$ 為量化的能量， $D(\omega)$ 為狀態密度函數 (Density of States)，一般皆使用簡化的Debye模型

$$D(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 v^3} \quad (2-30)$$

將聲子強度之定義代入並同乘以 $\bar{v}\hbar\omega D(\omega)$ ，整理可得聲子輻射傳輸方程式 (Equation of phonon radiative transfer, EPRT)

$$\frac{1}{|\bar{v}|} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \bar{s} \cdot \nabla_{\bar{r}} I_\omega = \frac{I_\omega^e - I_\omega}{|\bar{v}| \tau(\omega)} \quad (2-31)$$

將(2-31)對頻率與方向積分可得

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla_{\bar{r}} \cdot \bar{q} = 4\pi \int \frac{I_\omega^e}{v\tau_\omega} d\omega - \int \int \frac{I_\omega}{v\tau_\omega} d\omega d\Omega \quad (2-32)$$

其中能量 (Energy) 為

$$U = \int \int \frac{I_\omega}{v} d\omega d\Omega \quad (2-33)$$

熱通量 (Heat Flux) 為

$$\bar{q} = \int \int I_\omega d\omega d\Omega \quad (2-34)$$

由熱力學第一定律可知

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla_{\bar{r}} \cdot \bar{q} = 0 \quad (2-35)$$

所以可得聲子的平衡強度可表示為

$$4\pi \int \frac{I_\omega^e}{v\tau_\omega} d\omega = \int \int \frac{I_\omega}{v\tau_\omega} d\omega d\Omega \quad (2-36)$$

若假設聲子在每一個頻率下皆能達到平衡狀態，則可以得如下式

$$I_\omega^e = \frac{1}{4\pi} \int I_\omega d\Omega \quad (2-37)$$

若假設聲子跟頻率和鬆弛時間無關，則為灰體模型 (Gray Model)，能量強度方面可以直接把頻率積掉

$$I = \int I_\omega d\omega \quad (2-38)$$

$$I^e = \int I_\omega^e d\omega \quad (2-39)$$

變成跟頻率無關的能量強度，此時(2-31)式為

$$\frac{1}{|\vec{v}|} \frac{\partial I}{\partial t} + \vec{s} \cdot \nabla_{\vec{r}} I = \frac{I^e - I}{|\vec{v}| \tau} \quad (2-40)$$

2.5 邊界條件

以往討論分析巨觀方程式時，邊界條件的給定都為溫度或是熱通量，並不需要考慮其在邊界處的強度分佈情形為何，但是當在討論微觀熱傳時，聲子在邊界處上的作用情形卻是很重要，不能再只單純考慮溫度和熱通量的情況。

聲子碰撞過程中，在邊界(Boundary)和界面(Interface)處上，有下列幾種情況：放射(Emission)、吸收(Absorption)、反射(Reflection)以及穿透(Transmission)等三種情形。

我們將在邊界上的聲子儲存(Phonon Reservoirs)僅考慮有放射與吸收兩種現象，其他的界面處則考慮兩介質的物理性質所造成的反射與穿透的現象。通常兩介質間，會有界面熱阻存在，主要的原因是兩界面間存在著不連續面，阻礙了聲子的熱傳遞。

黑體邊界(Black Body Boundary)

假設從邊界入射到材料內部中，各方向之聲子強度為定值，其為邊界溫度 T 的平衡強度。

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) = I^e(T) \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-41)$$

平衡溫度邊界(Thermalizing Boundary)

分析熱傳區域的邊界可以視為一熱平衡且有一固定溫度的儲存器(Reservoirs)，會同時吸收入射的聲子強度並會依各方向均勻輻射出來。根據統計熱力學(Statistical Thermodynamics)，聲子能量強度可表為

$$I^e = \frac{C}{4\pi} (T_b - T_{ref}) \quad (2-42)$$

T_b 為邊界儲存器的溫度， T_{ref} 為參考溫度相對於所定義的材料比熱。

假設自邊界入射到材料內各方向之聲子強度固定且與入射到邊界各方向之聲子強度總和視為邊界溫度 T 時的平衡強度。

$$\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} < 0} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega + \int_{\hat{s} \cdot \hat{n} > 0} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega = 4\pi I^e(T) \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-43)$$

或

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) = \frac{4\pi I^e(T) - \int_{\hat{s} \cdot \hat{n} > 0} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega}{\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} < 0} d\Omega} \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-44)$$

絕熱邊界(Adiabatic Boundary)

假設在邊界上無熱流進出，亦無能量的轉換和消耗，一般可分為鏡射與擴散散射。

鏡射邊界(Specular Boundary)

根據 Snell's law 邊界處發生完美的反射，入射角等於反射角。

$$I(\vec{r}_b, \vec{s}_r, t) = I(\vec{r}_b, \vec{s}_i, t) \quad (2-45)$$

或

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) = I(\vec{r}_{BC}, \hat{s} - 2\hat{s} \cdot \hat{n}) \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-46)$$

擴散散射(Diffuse Boundary)

假設入射邊界的聲子強度和從邊界出射出的聲子強度總合為零，出射來的強度為依各方向均勻分佈。亦即入射邊界的聲子被完全均勻反射擴散回去材料內部。

$$\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} < 0} \hat{s} \cdot \hat{n} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega + \int_{\hat{s} \cdot \hat{n} > 0} \hat{s} \cdot \hat{n} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega = 0 \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-47)$$

或

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) = \frac{- \int_{\hat{s} \cdot \hat{n} > 0} \hat{s} \cdot \hat{n} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega}{\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} < 0} \hat{s} \cdot \hat{n} d\Omega} \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-48)$$

部分鏡射部分反射(Partially Specular and Partially Diffuse Boundary)

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) = pI(\vec{r}_b, \vec{s}_r, t) + (1-p) \frac{-\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} > 0} \hat{s} \cdot \hat{n} I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) d\Omega}{\int_{\hat{s} \cdot \hat{n} < 0} \hat{s} \cdot \hat{n} d\Omega} \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-49)$$

p 為鏡射因子(Specularity Factor)。

週期邊界(Periodic Boundary)

假設聲子強度呈現週期性之變化，即其偏離平衡強度之值有週期性。

$$I(\vec{r}_{BC}, \hat{s}) - I^e(T_{BC}) = I(\vec{r}_{Periodic}, \hat{s}) - I^e(T_{Periodic}) \quad \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2-50)$$

2.6 界面熱阻

界面熱阻的觀念主要是因為薄膜間界面不同材料間的晶格出現中斷，阻礙了聲子的傳輸，加上聲子穿過界面時，因材料晶格發生變化因而產生散射現象，一部分聲子穿透界面，而另一部分則會發生反射，因此在界面處產生溫降 (Temperature Drop)。所以利用聲子輻射熱傳模式處理多層膜結構時，就必須針對界面問題加以處理。在Phelan和Chen的研究中指出，薄膜間界面熱阻對於整個系統的熱傳導具有重要的影響。因此，顯示出界面熱阻的探討更為重要，目前主要可分為幾種理論模式來模擬界面熱阻的現象。本節將針對各種界面熱阻模式做一概要敘述性的介紹。

界面熱阻的定義為：

$$R = \frac{\Delta T}{q} \quad (2-51)$$

其中 ΔT 為界面兩端的溫差， q 為單位面積的熱通量。

等效熱傳導係數為定義在微尺度下材料的熱傳遞能力，利用類似 Fourier 定律之形式，使用熱通量、兩端溫度差與材料厚度，可定義出等效熱傳導係數

$$K_e = q \frac{L}{\Delta T} \quad (2-52)$$

其中 L 為薄膜厚度。

最初，Marshall 等人所提出的界面層理論模式(Interfacial Layer Model)簡稱為 ILM。此模式假設在薄膜與基材間存在一界面層，此層的性质與薄膜相同，其擴散率(Diffusivity)比薄膜小約 10~100 倍，而厚度只有薄膜的百分之一到百分之十。此層被模擬成具有厚度的界面層，形成三層材料的複合體，且此複合體的界面溫度與熱通量必須為連續。

2.6.1 聲異失諧模式(AMM)

Little 在 1959 年提出 AMM(Acoustic Mismatch Model)理論，假設聲子在界面的相互作用，僅考慮穿透與反射的效應而不考慮散射效應；反射能量即界面熱阻所消耗的能量，並進而推導出輻射模式的熱傳公式，亦即邊界上的熱通量與界面處薄膜與基材溫度的四次方差成正比，界面熱阻則隨著溫度的負三次方成正比。

$$q = \frac{k^4}{8\pi^2\hbar^3} \left[\sum_j v_{1,j}^{-2} \right] T_{12} \int_{Z=0}^{\frac{\hbar\omega_D}{kT_2}} \frac{Z^3}{\exp(Z)-1} dZ (T_1^4 - T_2^4) \quad (2-53)$$

$$R = \left\{ \frac{k^4}{2\pi^2\hbar^3} \left[\sum_j v_{1,j}^{-2} \right] T_{12} \int_{Z=0}^{\frac{\hbar\omega_D}{kT_2}} \frac{Z^3}{\exp(Z)-1} dZ \right\}^{-1} T_2^{-3} \quad (2-54)$$

其中 $Z = \frac{\hbar\omega}{k_b T}$ ，下標 j 表示聲子的模態， T_1, T_2 表示兩端溫度。

反射部分假設為鏡面反射，即入射角等於反射角；穿透方面，遵循幾何光學中的 Snell's Law，亦為即入射角和折射角

$$\frac{\sin \theta_1}{v_1} = \frac{\sin \theta_2}{v_2} \quad (2-55)$$

散射部分假設為彈性散射，即穿透與反射的聲子頻率和入射頻率相同，不會隨著碰撞而改變。界面反射率和穿透率由(2-53) (2-54) (2-55)推導為

$$R_{12}(\mu_1) = \left| \frac{z_1\mu_1 - z_2\mu_2}{z_1\mu_1 + z_2\mu_2} \right|^2 \quad (2-56)$$

$$T_{12}(\mu_1) = \frac{4z_1z_2\mu_1\mu_2}{(z_1\mu_1 + z_2\mu_2)^2} \quad (2-57)$$

其中 μ_i 為方向餘弦， $z_i = \rho_i v_i$ 為材料的聲阻抗(Acoustic Impedance)， ρ_i 為材料密度， v_i 材料聲子速度。且符合下列之關係

$$R_{21}(\mu_2) = R_{12}(\mu_1) \quad (2-58)$$

$$T_{21}(\mu_2) = T_{12}(\mu_1) \quad (2-59)$$

若假設聲子在界面處的散射為非彈性，則不再遵循 Snell's Law，入射角與反射角之關係則為

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \left(\frac{C_2 v_2}{C_1 v_1} \right)^{1/2} \quad (2-60)$$

其中 C_i 為材料比熱。

過去的文獻研究指出 AMM 僅適用於低溫。因為低溫時聲子的波長較長，與界面粗糙度相比較之下，影響較小。若溫度較高的情況下，DMM 會與實驗的結果較吻合，所以目前大部分的研究都是採用下一小節的 DMM 來分析。

2.6.2 散異失諧模式 (DMM)

Swartz 在 1989 年提出散異理論模式 (Diffuse Mismatch Model)，其假設與 AMM 最主要的差異在於，當聲子傳遞至邊界時，聲子不再被視為完全不受散射效應的影響。而是假設所有的聲子在邊界上均受到無方向性的擴散散射 (Diffuse Scattering)，且散射後聲子的狀態與散射前無關。

如欲滿足此一理論的假設，則 AMM 中穿透率及反射率值必須加以修正。由於聲子忘記其入射方向，因此從某一方向入射所得之穿透率可視為另一方向入射所得的反射率

$$T_{12} = R_{21} \quad (2-61)$$

$$R_{12} = 1 - R_{21} \quad (2-62)$$

Chen 由能量守恆的觀點出發推導出另一種穿透率的表示法，稱為非彈性散異理論模式 (Inelastic Diffuse Mismatch Model)。假設所有頻率的聲子均能穿透界面，亦即假設聲子在界面處所受到的散射可以是非彈性。界面處能量守恆方程式表示

$$R_{12} \int_{2\pi} I_1^e(T) \cos \theta_1 d\Omega_1 = R_{21} \int_{2\pi} I_2^e(T) \cos \theta_2 d\Omega_2 \quad (2-63)$$

強度與比熱之關係為

$$\frac{dI_0}{dT} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\omega_D} v \hbar \omega D(\omega) \frac{df_0}{dT} d\omega = \frac{vC}{4\pi} \quad (2-64)$$

整理後可得穿透率之表示式

$$T_{12} = \frac{C_2 v_2}{C_1 v_1 + C_2 v_2} \quad (2-65)$$

使用能量守恆的概念來處理

$$\int_{2\pi} \mu I_1^- d\mu = R_{12} \int_{2\pi} \mu I_1^+ d\mu + T_{21} \int_{2\pi} \mu I_2^- d\mu \quad (2-66)$$

$$\int_{2\pi} \mu I_2^+ d\mu = R_{21} \int_{2\pi} \mu I_2^- d\mu + T_{12} \int_{2\pi} \mu I_1^+ d\mu \quad (2-67)$$

積分後可得

$$I_1^- = -2 \left(R_{12} \int_{2\pi} \mu I_1^+ d\mu + T_{21} \int_{2\pi} \mu I_2^- d\mu \right) \quad (2-68)$$

$$I_2^+ = 2 \left(R_{21} \int_{2\pi} \mu I_2^- d\mu + T_{12} \int_{2\pi} \mu I_1^+ d\mu \right) \quad (2-69)$$

2.6.3 散射聲異理論模式(SMAMM)

此一模型是由 Prasher 和 Phelan 在 2001 年所提出，以 EPRT 及 ERT (Equation of Radiative Transfer) 中輻射熱傳的觀點，以波的傳遞形式來探討界面熱阻的影響，而進一步將 AMM 模式加以修正，提出另一種界面熱阻模式，稱為 SMAMM 模式(Scattering-Mediated Acoustic Mismatch Model)。其波動方程為

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{1}{g} \frac{dy}{dt} = \frac{d^2 y}{dx^2} \quad (2-70)$$

式(2-70)其解如下

$$\tilde{v} = \frac{v}{\left(1 + \frac{i}{g\omega}\right)^{1/2}} = \frac{v}{a' + ib'} \quad (2-71)$$

$$g = \frac{\tau}{\sqrt{1 + \left(\frac{1}{T\omega}\right)^2}} \quad (2-72)$$

$$a' = \sqrt{1 + \left(\frac{1}{2T\omega}\right)^2} \quad b' = \frac{1}{2T\omega} \quad (2-73)$$

其中 g 為阻尼係數， \tilde{v} 為一重新定義的等效速度， T 為穿透率。入射角和折射角遵循 Snell's Law

$$\frac{\sin \theta_1}{\tilde{v}_1} = \frac{\sin \theta_2}{\tilde{v}_2} \quad (2-74)$$

以入射角 θ_1 來表示折射角 θ_2 則為

$$\frac{\cos \theta_2}{\tilde{v}_2} = \sqrt{\left(\frac{1}{\tilde{v}_2}\right)^2 - \left(\frac{1}{\tilde{v}_1}\right)^2 \sin^2 \theta_1} \quad (2-75)$$

整理之後可得穿透率和反射率

$$R(\theta_1) = \frac{\left[\frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a_1' - \frac{A}{\rho_2}\right]^2 + \left[\frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a_1' - \frac{B}{\rho_2}\right]^2}{\left[\frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a_1' + \frac{A}{\rho_2}\right]^2 + \left[\frac{\cos \theta_1}{\rho_1 v_1} a_1' + \frac{B}{\rho_2}\right]^2} \quad (2-76)$$

$$T(\theta_1) = 1 - R(\theta_1) \quad (2-77)$$

其中 A 和 B 分別為式(2-76)的實數和虛數部分。

2.7 射線效應(Ray Effect)

射線效應指出了使用分離座標法的基本缺點，它是由於方向角變化的離散化造成的。這個效應是從方向角上輻射強度連續變化把它離散成特定的幾個方向所造成的。只要有方向角上的離散化近似，就會有這種效應，儘管是空間格點上用很精確的高解析算則亦會如此。

考慮一個二維的黑體封閉邊界，如圖 2-8 所示，三面邊界是冷的，最下層雖然也是冷的，但是在中間的地方有一小塊熱源，以最簡單的假設來表示，亦即介質材料性質不會受到熱輻射的影響而發生散射機制。在物理現象上，四面冷的邊界會一直連續接收到從底部熱源所散發的熱輻射。因此造成在最上端的邊界面，會沿著邊界面呈現對稱且連續的熱通量分佈(Heat Flux Distribution)。利用分離座標法把方向角離散化，考慮把方向角離散化成六個方向從熱源向外射出，之後可以精確的解得這六個方向的根與加權數。由於介質是可穿透的，所以到達頂端面的強度等於熱源所散發的強度。除了這六個方向的強度可以知道外，其餘的地

方因為接受不到輻射，所以這些地方的強度為零。

方向角離散的近似會產生失真的熱通量分佈，造成某些地方受到有現的熱輻射，有些地方則都接收不到熱輻射，這種情況不符合真實的物理現象，此種效應稱為射線效應(Ray Effect)。

由於介質是自然的，在裡面各個方向向外射出的強度是連續分佈且已知的，很難用近似法直接去求出各個方向的強度，有一種方法可以來處理，即假設強度會隨著方向角而改變，並用有限的方向數來離散化。

最後發現射線效應主要是因為把方向角離散化造成的，跟空間上的離散化沒有相關聯且獨立的。

2.8 假散射(False Scattering)

假散射是由空間離散化所造成的，它是非物理現象，所以又可以稱為數值散射(Numerical Scattering)。此效應通常在計算流體力學中(CFD)稱為數值擴散或假擴散。在CFD中，沒有方向角的離散化，則數值擴散(Numerical Diffusion)和數值散射(Numerical Scattering)是相對應的。因此假散射和方向角離散沒有相關聯且是獨立的。

如圖 2-9 所示，左上方的箭頭代表入射的輻射強度，虛線代表強度為零的基準線，實線部分則表示重新示意的強度分度，分別在介質中考慮有散射機制和非散射機制的情況。四面邊界都是冷的，左上方的邊界有一熱輻射平行入射。如果介質內部有散射能量，有些能量會被散射到下半部分的地方，能量強度如圖 2-9(a)實線所示。如果介質內部沒有散射能量，就沒有散射機制可以讓能量轉移到下半部分區域，因此能量分佈會出現不連續，如圖 2-9(b)實線所示。

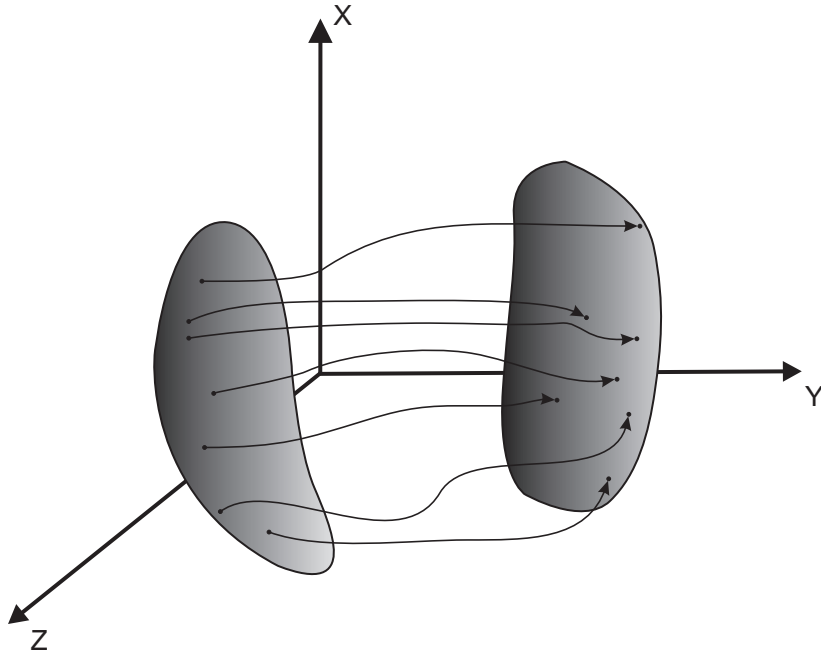


圖 2-1 流線系綜(Ensemble)示意圖

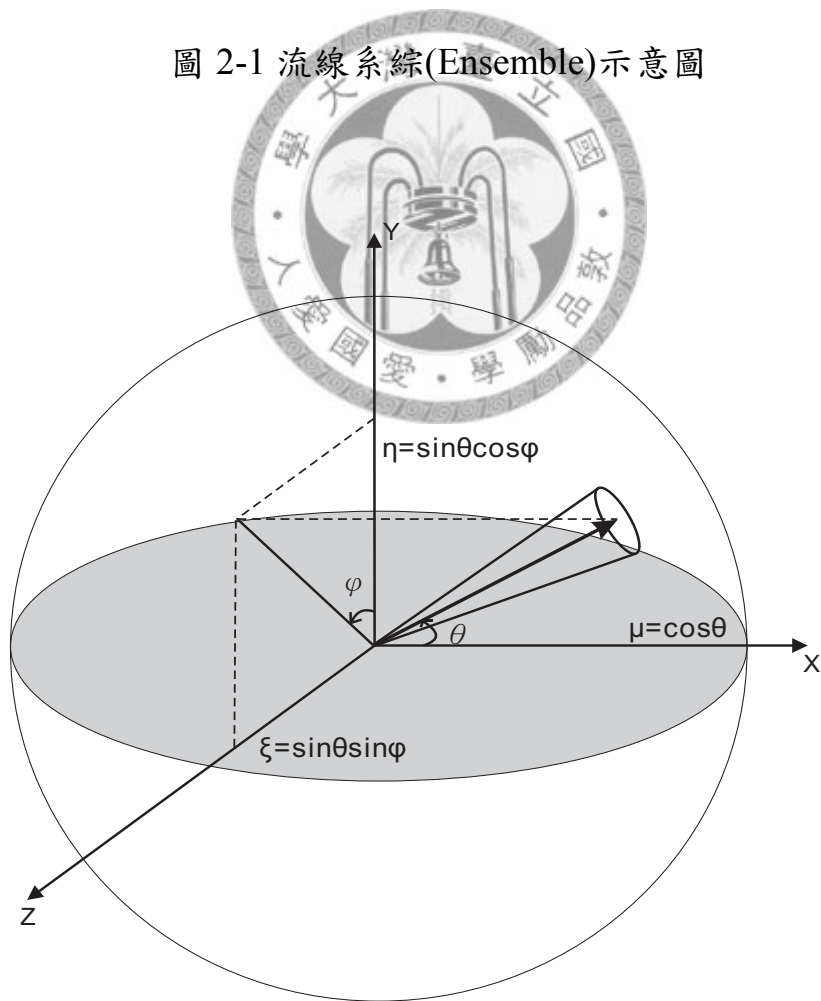


圖 2-2 空間立體角(Solid angle)示意圖

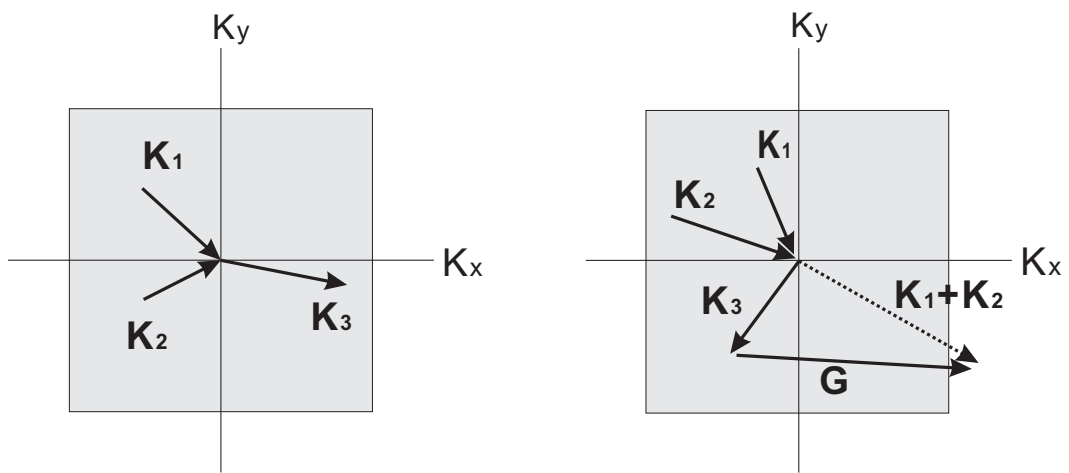


圖 2-3 三聲子過程示意圖(正常過程和倒逆過程)

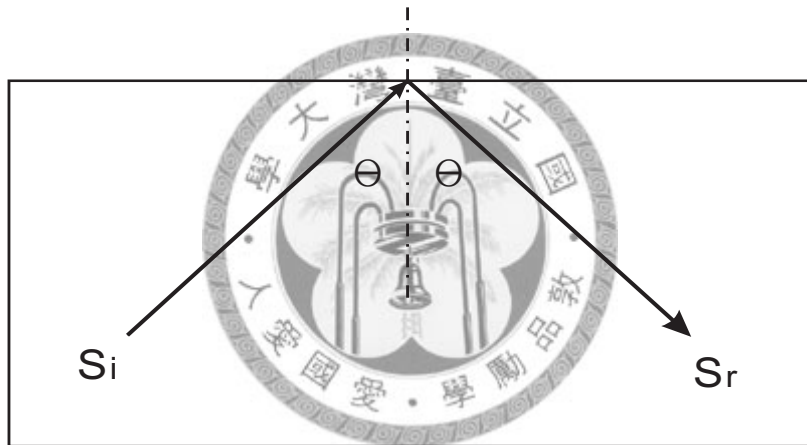


圖 2-4 邊界鏡面反射

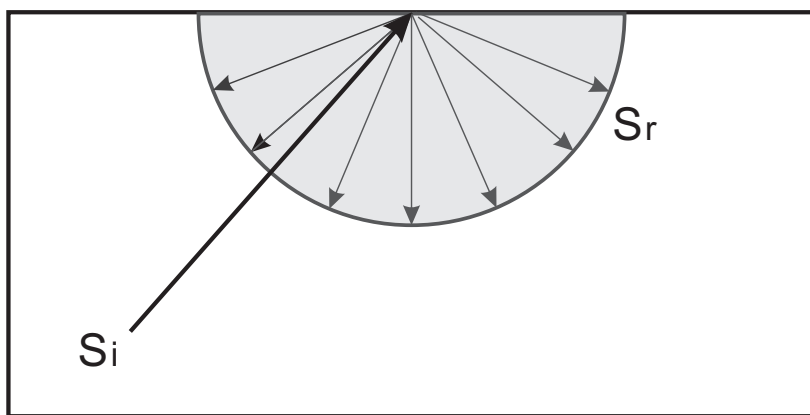


圖 2-5 邊界擴散反射

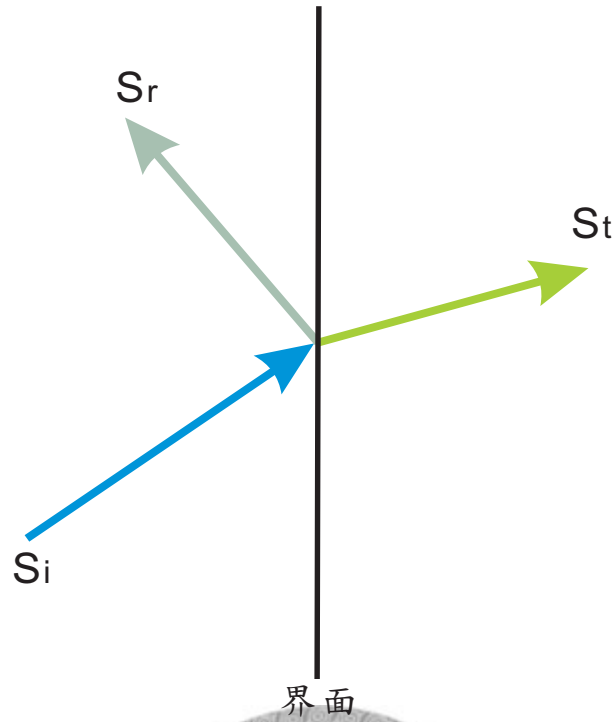


圖 2-6 AMM 界面示意圖

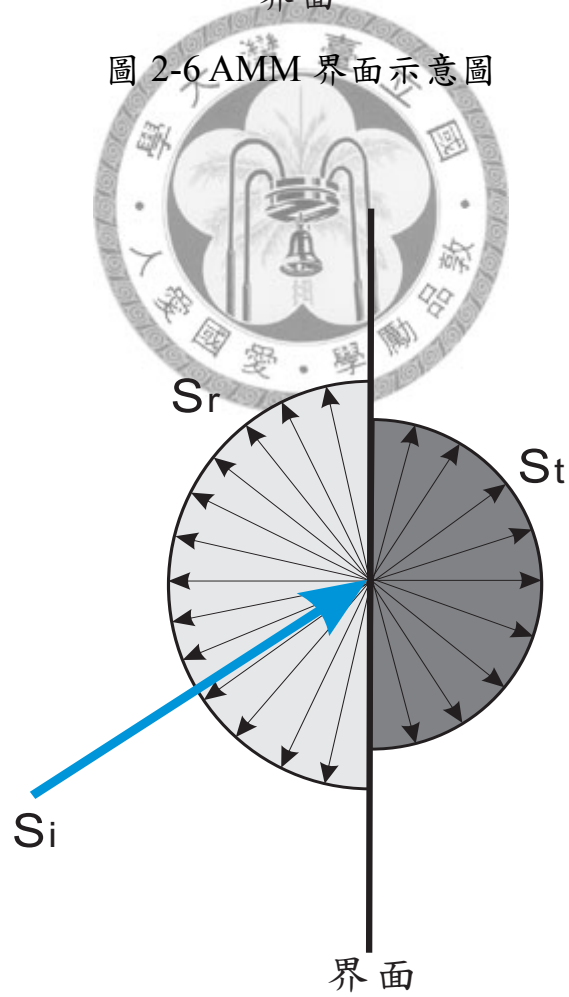
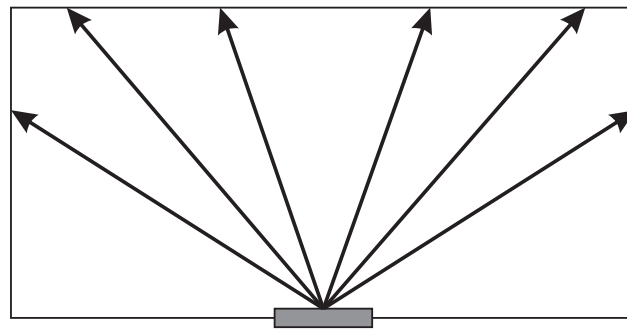


圖 2-7 DMM 界面示意圖



Hot Source

圖 2-8 射線效應示意圖

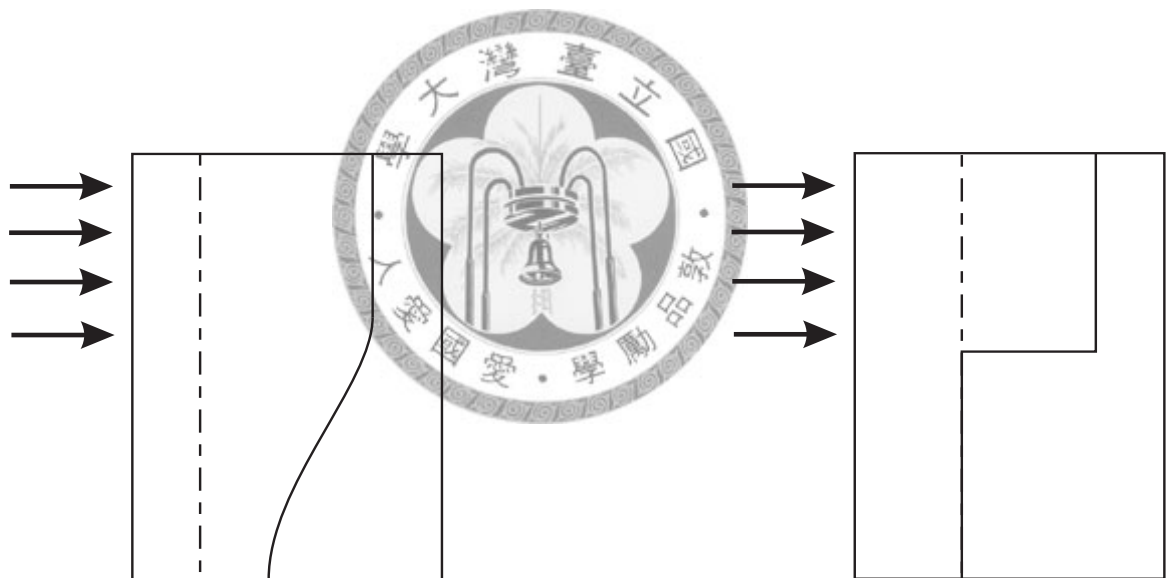


圖 2-9 假散散示意圖；

左邊(a)介質內有散射機制，右邊(b)介質內沒有散射機制發生

第三章 數值方法

由偏微分方程式可知，Boltzmann 方程式為有源項的雙曲線型微分方程式。近幾年來在計算流體力學中，許多新的雙曲線型守恆律算則逐漸被發展出來，應用在求解尤拉方程式(Euler Equation)以及那維爾-史托克方程式(Navier - Stokes Equations)。這些方程具有的特性是在流場中，平滑區具有二階以上的準確度，在不連續處附近又能陡峭且不振盪地解析到不連續解。

3.1 方向離散

3.1.1 離散座標法(Discrete Ordinate Method)

聲子輻射傳輸方程(EPRT)為同時含有積分微分的方程式，處理聲子強度方面，對空間立體角的積分是利用離散座標法(Discrete Ordinate Method)將立體角分為有限方向座標的組合，而積分就可藉由在這些點的函數值與其權值(weighting)組成，對於宏觀量的積分也可由同樣的方法求得。式(3-1)為離散座標將積取代的形式

$$\int_{4\pi} f(\hat{s}) d\Omega \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\hat{s}_i) \quad (3-1)$$

其中 w_i 為在 \hat{s}_i 方向上之權值。式(3-1)說明了將整個立體角的聲子輻射強度分為 n 個分量再乘上其對應的權重函數 w_i (Quadrature Weights) 相加起來。使用式(3-1)，(2-31)式可被取代為 n 條方程式

$$\frac{1}{|\vec{v}|} \frac{\partial I(\vec{r}, \hat{s}_i, t)}{\partial t} + \hat{s}_i \cdot \nabla_{\vec{r}} I(\vec{r}, \hat{s}_i, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^n w_i I(\vec{r}, \hat{s}_i, t) - I(\vec{r}, \hat{s}_i, t) \quad (3-2)$$

$i = 1, 2, \dots, n$

n 代表方向數可以依不同數值方法或統馭方程式的需求來決定方向數的多寡，在每個方向上所對應的方向餘弦(Direction Cosine)值也就不同。因此，解 n 條聯立方程式得到每個方向的聲子強度，也就可積分得到溫度及熱通量

$$\frac{C|\vec{v}|T}{4\pi} = \int_{4\pi} I(\vec{r}, \hat{s}, t) d\Omega \approx \sum_{i=1}^n w_i \hat{s}_i I(\vec{r}, \hat{s}_i, t) \quad (3-3)$$

$$\bar{q} = q_i \hat{e}_i = \int_{4\pi} (\hat{s} \cdot \hat{e}_i) I(\vec{r}, \hat{s}, t) d\Omega \approx \sum_{i=1}^n w_i \hat{s}_i I(\vec{r}, \hat{s}_i, t) \quad (3-4)$$

在聲子熱傳問題中，由於聲子的速度變化量極小，可假設為定值，所以離散座標法只需要將整個空間的立體角離散成 n 個離散點，離散的選擇方法有：

(1) S_N 方法

先將整個空間的立體角分成 n 個離散點，再利用公式求得各點的權值 (Modest,1993)。

$$\int_{4\pi} f(\hat{s}) d\Omega = \int_0^{2\pi} f(\hat{s}) d\mu \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\mu_i) \quad (3-5)$$

(2) Gauss-Legendre 數值積分公式

為了提高離散座標法的積分精確度，可使用 Gauss-Legendre 數值積分。在一維問題中，可使用 μ 方向一組 Gauss-Legendre 座標點，其積分型式為

$$\int_{4\pi} f(\hat{s}) d\Omega = \int_0^{2\pi} f(\hat{s}) d\mu \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\mu_i) \quad (3-6)$$

在二維問題中，在 μ 與 ϕ 方向上使用兩組 Gauss-Legendre 座標點，其積分型式為

$$\int_{4\pi} f(\hat{s}) d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 f(\hat{s}) d\mu d\phi \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w_{\mu,i} w_{\phi,j} f(\mu_i, \phi_j) \quad (3-7)$$

利用離散座標法將聲子的傳播方向離散後，EPRT 變成一組含源項的線性流動方程 (linear convection equation)。由含有積分和微分的方程式轉為單純的微分方程式，變得較容易做數值計算。接下來的數值計算上，可以分為空間及時間兩部分來分析處理。

3.2 空間離散

3.2.1 迎風算則 (Upwind Scheme)

利用迎風算則可以正確且不震盪地解析到不連續的解，迎風算則利用特徵線的方向來決定通量是為一階精度的差分格式。先考慮常係數方程，以純量線性平流方程為例

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + a \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0 \quad , \quad x \in \mathbb{R} \quad , \quad t > 0 \quad (3-8)$$

其中 a 為一給定常數，代表特徵線的傳播方向。這是最簡單的雙曲線型方程，又被稱為對流方程 (Convection Equation)。雖然(3-8)非常簡單，但其差分格式的構造及差分格式性質的討論，卻是後續在討論複雜雙曲線型方程和方程組之基礎。它的差分格式可以推廣到變係數方程及方程組，擬線性方程及方程組。

對於(3-8)給予初始條件為

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (3-9)$$

可解得到沿方程的其中一條特徵線

$$x - at = \xi \quad (3-10)$$

其中 ξ 為常數且可表示為

$$u(x, t) = u_0(\xi) = u_0(x - at) \quad (3-11)$$

迎風算則在實際計算中引起普遍的重視，因而衍生了很多好的方法與技巧，迎風算則的基本想法是很簡單的。就是在雙曲線型方程中，關於空間偏導數用在特徵線方向一側的單邊差商來取代，所以(3-8)的迎風算則型式為

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad a > 0 \quad (3-12)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} = 0, \quad a < 0 \quad (3-13)$$

其中 Δt 是時間步長， Δx 是空間步長。

將(3-12)與(3-13)兩式合併可以將微分項近似為

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a^+ \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x} + a^- \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x} = 0 \quad (3-14)$$

其中 $a^\pm = \frac{a \pm |a|}{2}$ ，差分方向是由波傳方向決定，故符合方程之物理特性，是個穩定的數值方法。

3.2.2 雙曲線型守恆律算則

考慮一維具有源項之雙曲線型守恆方程式為

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = S \quad (3-15)$$

為求解上式，將其離散化以表示為以下之型式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{f_{j+1/2}^N - f_{j-1/2}^N}{\Delta x} = S \quad (3-16)$$

或是

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda(f_{j+1/2}^N - f_{j-1/2}^N) + \Delta t S \quad (3-17)$$

其中 $\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ ， u_j^n 表示再計算格點 $x_j = j\Delta x$ 且時間在 $t_n = n\Delta t$ 時的解析解 $u(x_j, t_n)$

的數值解。將(3-14)表示成(3-16)的主要目的，即為尋找且建立適合的數值通量 (Numerical Flux)，以獲得穩定解，並達到在不連續處不振盪的特性。

套用迎風算則，一階算則型式如下

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \mu \frac{\partial I_\omega}{\partial x} = \frac{I_\omega^0 - I_\omega}{v\tau} \quad (3-18)$$

$$I_j^{n+1} = I_j^n - \lambda(\hat{f}_{j+1/2}^N - \hat{f}_{j-1/2}^N) + \frac{\Delta t}{\tau}(I_j^{0,n} - I_j^n) \quad (3-19)$$

其中

$$\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (3-20)$$

數值通量正負的部分表示為

$$\hat{f}_{j+1/2}^N = v\mu^+ I_j^n + v\mu^- I_{j+1}^n \quad (3-21)$$

$$\hat{f}_{j-1/2}^N = v\mu^+ I_{j-1}^n + v\mu^- I_j^n \quad (3-22)$$

通常在解數值解的時候會設定一個基本的條件。先分析差分格式解的依賴區域，然後從差分格式解的依賴區和對流方程初始值問題解的依賴區域之間的關係，可以推導出差分格式收斂的一個必要條件。這個條件稱為 Courant Friedrichs Lewy 條件或稱 C.F.L.。其時間步可由 CFL(Courant Friedrichs Lewy)條件決定

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_{\max}}。$$

3.3 時間離散(Time Discrete)

3.3.1 Euler Method

Euler method 型式如下

$$\frac{I_{j,i}^{n+1} - I_{j,i}^n}{\Delta t} + \mu_i^+ \frac{I_{j,i}^n - I_{j-1,i}^n}{\Delta x} + \mu_i^- \frac{I_{j+1,i}^n - I_{j,i}^n}{\Delta x} = \frac{I_j^{(e)n} - I_{j,i}^n}{\tau} \quad (3-23)$$

可以由已經的時間 n 來求得下一時間步 n+1 時的未知數。如圖(3-1)。

3.3.2 隱式算則 (Implicit Scheme)

本文以隱式算則(Implicit Scheme)來分析模擬，因顯式算則(Explicit Scheme)最大的缺點是時間步的步長受限 CFL 的條件限制，所以當處理穩態問題時，此限制將造成收斂速度緩慢，而隱式算則因為無時間步長的限制，所以在不需要考慮暫態行為的問題，會使用隱式算則來處理，將時間微分向以一向後差分(Backward)取法，成為向後 Euler 法，其為一階精準度。則 EPRT 所表達的隱式算則如下

$$\frac{I^{n+1} - I^n}{\Delta t} + \hat{s} \cdot \nabla I^{n+1} = \frac{I^{(e)n+1} - I^{n+1}}{\tau} \quad (3-24)$$

上式的表達成通量形式為

$$\frac{I_{i,j}^{n+1} - I_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{\partial F_{i,j}^{n+1}}{\partial x} = \frac{I_i^{(e)n+1} - I_i^{n+1}}{\tau} \quad (3-25)$$

一維問題中，使用 μ 方向一組 Gauss-Legendre 座標點

$$\frac{I_i^{n+1} - I_i^n}{\Delta t} + \mu^+ \frac{I_i^{n+1} - I_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + \mu^- \frac{I_{i+1}^{n+1} - I_i^{n+1}}{\Delta x} = \frac{I_i^{e,n+1} - I_i^{n+1}}{\tau} \quad (3-26)$$

$$\begin{cases} \frac{I_i^{n+1} - I_i^n}{\Delta t} + \mu^+ \frac{I_i^{n+1} - I_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} = \frac{I_i^{e,n+1} - I_i^{n+1}}{\tau} \\ \frac{I_i^{n+1} - I_i^n}{\Delta t} + \mu^- \frac{I_{i+1}^{n+1} - I_i^{n+1}}{\Delta x} = \frac{I_i^{e,n+1} - I_i^{n+1}}{\tau} \end{cases} \quad (3-27)$$

整理後如下

$$\mu > 0, \mu^+ \quad I_{i-1,j}^{n+1} \left[-\frac{\Delta t}{\Delta x} \mu^+ \right] + I_{i,j}^{n+1} \left[1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} \mu^+ + \frac{\Delta t}{\tau} \right] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-28)$$

$$\mu < 0, \mu^- \quad I_{i,j}^{n+1} \left[1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \mu^- + \frac{\Delta t}{\tau} \right] + I_{i+1,j}^{n+1} \left[\frac{\Delta t}{\Delta x} \mu^- \right] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-29)$$

再將(3-28)(3-29)兩式結合如下

$$I_{i-1}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+] + I_i^{n+1}[1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+ - \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^- + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i+1}^{n+1}[\mu^- \frac{\Delta t}{\Delta x}] = I_i^n + \frac{\Delta t}{\tau} I_i^{e,n+1} \quad (3-30)$$

二維問題中，在 μ 與 ϕ 方向上使用兩組 Gauss-Legendre 座標點

$$\begin{aligned} & \frac{I_{i,j}^{n+1} - I_{i,j}^n}{\Delta t} + \mu^+ \frac{I_{i,j}^{n+1} - I_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} + \mu^- \frac{I_{i+1,j}^{n+1} - I_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} \\ & + \phi^+ \frac{I_{i,j}^{n+1} - I_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} + \phi^- \frac{I_{i,j+1}^{n+1} - I_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} = \frac{I_{i,j}^{e,n+1} - I_{i,j}^{n+1}}{\tau} \end{aligned} \quad (3-31)$$

整理後如下

$\mu > 0$ ， μ^+ & $\phi > 0$ ， ϕ^+

$$I_{i-1,j}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+] + I_{i,j}^{n+1}[1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+ + \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+ + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i,j-1}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-32)$$

$\mu > 0$ ， μ^+ & $\phi < 0$ ， ϕ^-

$$I_{i-1,j}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+] + I_{i,j}^{n+1}[1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+ - \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^- + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i,j+1}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^-] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-33)$$

$\mu < 0$ ， μ^- & $\phi > 0$ ， ϕ^+

$$I_{i,j}^{n+1}[1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^- + \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+ + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i+1,j}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^-] + I_{i,j-1}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-34)$$

$\mu < 0$ ， μ^- & $\phi < 0$ ， ϕ^-

$$I_{i,j}^{n+1}[1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^- - \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^- + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i+1,j}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^-] + I_{i,j+1}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^-] = I_{i,j}^{n+1} + I_{i,j}^{e,n+1} \quad (3-35)$$

(3-32)(3-33) (3-34)(3-35)結合如下

$$\begin{aligned} & I_{i-1,j}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+] + I_{i,j}^{n+1}[1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^+ - \frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^- + \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+ - \frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^- + \frac{\Delta t}{\tau}] + I_{i+1,j}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta x}\mu^-] \\ & + I_{i,j-1}^{n+1}[-\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^+] + I_{i,j+1}^{n+1}[\frac{\Delta t}{\Delta y}\phi^-] = I_{i,j}^n + I_{i,j}^{e,n+1} \end{aligned} \quad (3-36)$$

3.4 無因次化

關於探討的問題，本文皆使用灰體模式來分析模擬，關於灰體模型(Gray Model)部分，因無需考慮材料內部的詳細材料參數並不考慮跟頻率之間的相關性，以材料的比熱、聲子速度以及聲子的平均自由程，就可以進行分析模擬熱傳問題，是一種比較容易分析的一種方法。以下列出在計算過程中，所用的無因次化。

位置 $\hat{x} = \frac{x}{L}$ (3-37)

時間 $\hat{t} = \frac{t}{L/v}$ (3-38)

比熱 $\hat{C} = \frac{C}{C_0}$ (3-39)

溫度 $\hat{T} = \frac{T - T_2}{T_1 - T_2} = \frac{T - T_2}{\Delta T}$ (3-40)

強度 $\hat{I} = \frac{I - I_0}{\Delta I} \quad \Delta I = \frac{C|\bar{v}|\Delta T}{4\pi} \quad I_0 = \frac{C|\bar{v}|T_2}{4\pi}$ (3-41)

熱通量 $\hat{q} = \frac{q}{q_0} \quad q_0 = \frac{C|\bar{v}|\Delta T}{4\pi}$ (3-42)

分析所使用的材料參數如表 3-1 所示。

表 3-1 300K~800K 矽/鍺薄膜材料的材料性質

Material	Model	Specific Heat $10^6 \left(\frac{\text{J}}{\text{m}^3\text{K}} \right)$	Group Velocity $\left(\frac{\text{m}}{\text{s}} \right)$	Mean Free Path $\left(\text{\AA} \right)$
Si (300K)	Dispersion	0.943	1790	3120
Ge(300K)	Dispersion	0.885	1010	1740
Si (500K)	Dispersion	0.999	1860	1340
Ge(500K)	Dispersion	0.904	1040	945
Si (800K)	Dispersion	1.020	1900	695
Ge(800K)	Dispersion	0.910	1050	592

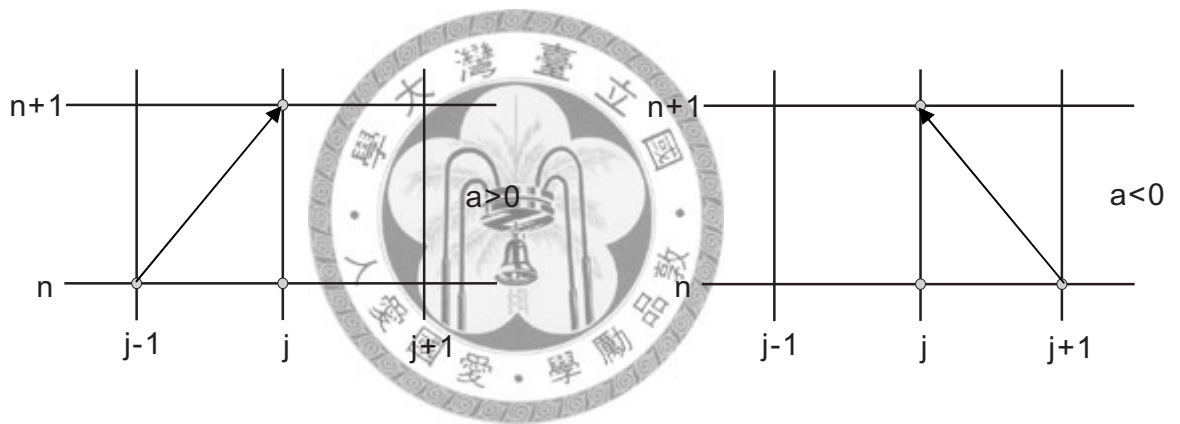


圖 3-1 迎風算則示意圖

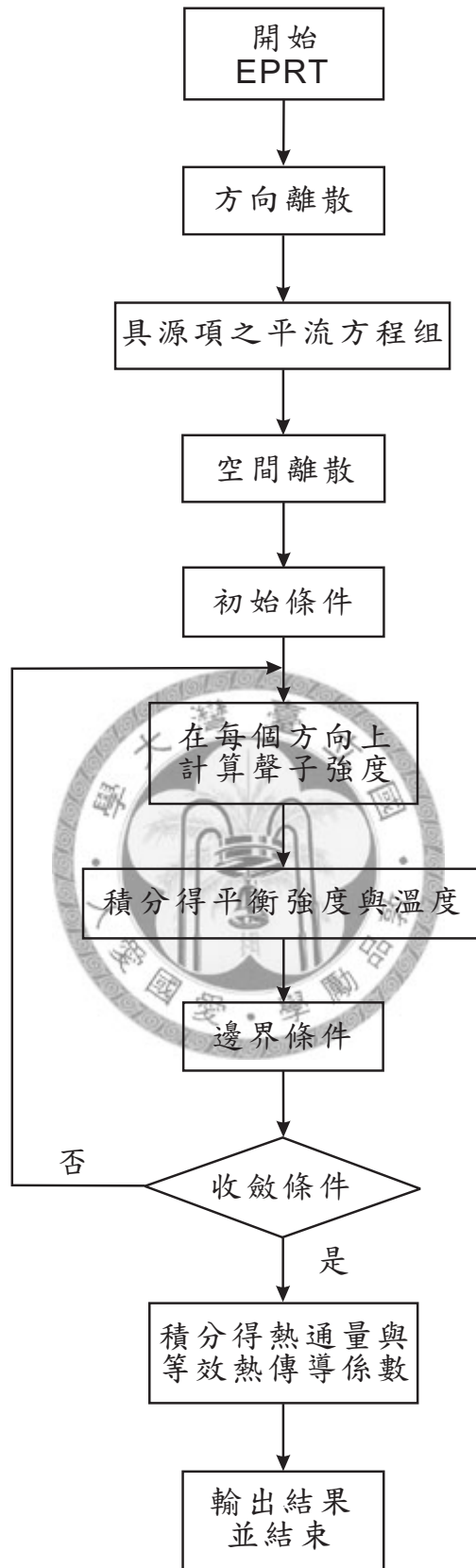


圖 3-2 數值方法流程圖

第四章 數值模擬結果與討論

本文主要是利用較小的計算量，嘗試去模擬 Tian, W. & Yang, R. [29]使用直接蒙地卡羅法(Direct Monte Carlo method, DSMC)所模擬出的結果，試著以較小的計算量得到近似的結果再做比較。由文獻[29]所知，緊密型(Compacted)的複合材料因為材料間的相沒有連續性，擁有更多的材料界面，故聲子在裡頭進行傳遞的過程中會遇到更多的阻礙，因此所計算出的等效熱傳導係數，會比線型(Wire)所計算獲得的等效熱傳導係數來得低，幾乎低了一半左右。接下來，我們試著先由分析一維薄膜超晶格(Superlattice)的熱傳問題，再接著分析二維線型(Wire)及緊密型(Compacted)奈米複合材料的模型問題線材在不同尺寸下之等效熱傳導係數，再與 R. Yang [29]文獻等人所計算的結果做比較。

4.1 薄膜超晶格結構

若我們計算模擬的薄膜厚度遠小於其他方向時，則問題可簡化成一維類型來分析，如圖 4-1 所示，可以取其單位晶胞(Unit cell)來做計算區域。首先測試隱式迎風算則在薄膜厚度設 $L_{Si} = 1\text{nm}$ 的格點收斂情形，計算區域設寬度 $L = 2L_{Si}$ 來測試，單位晶胞兩側的溫差固定為 1K ($300\text{K} \sim 301\text{K}$)，邊界條件設為週期性邊界，界面條件為 IDMM，在 x 方向($x = 0 \sim 1$)使用均勻格點，格點數分別以 50、100、200 點來測試，在 x 之餘弦(cosine, μ)方向($\mu = -1 \sim +1$)使用 Gauss-Legendre 座標點作數值積分，分別測試 10~150 個座標點，CFL 值設為 100，等效熱傳導係數與格點的關係圖的測試結果如圖 4-2 所示。在本算例的隱式迎風算則計算皆使用空間格點 100 與方向數 100，其與空間格點 100 與方向數 150 所計算得之等效熱傳導係數相對誤差小於 $5 \times 10^{-7}\%$ 。

計算鍍/矽薄膜超晶格等效熱傳導係數與尺寸之關係，固定 $L/L_F = 2$ ，改變 L_F 之值從 $10\text{nm} \sim 1000\text{nm}$ ，計算達穩態收斂條件為溫度差之殘值小於 10^{-8} 。圖

4-3(a)(b)為 $L_F = 10\text{nm}$ 之穩態無因次溫度和熱通量分布圖，由圖 4-3(a)可看出在界面上，溫度不連續現象非常明顯，在其他各段材料內部之溫度分布趨近為水平，顯示聲子在材料內部受到很少的散射，因此能量不會有太大變化，聲子所受之散射主要是在於超晶格界面上。圖 4-4(a)(b)分別為 $L_F=100\text{nm}$ 之穩態無因次溫度和熱通量分布圖，可觀察到界面之溫度的不連續性有減小的現象，表示界面作用相對逐漸變小，但是各段材料內部之溫度分布卻變得較陡斜，顯示材料內部的散射已逐漸增加中。圖 4-5(a)(b)為 $L_F=1000\text{nm}$ 之穩態無因次溫度和熱通量分布圖，可觀察到界面上之溫度不連續明顯變小，顯示界面作用變得更小，而在各段材料內部的溫度梯度依材料的熱傳導能力呈現不同斜率，由於矽的傳導能力較佳，故溫度梯度較小(中間部分)，此時材料內部的散射開始變得相當重要。圖 4-6 為等效熱傳導係數與薄膜尺寸之關係圖，由 $1\text{nm}\sim 100\mu\text{m}$ 計算的熱傳導率可發現，由尺寸效應所造成熱傳導能力大幅下降，然而隨著尺寸的增加，熱傳導率也越來越高。

接著再測試鍺/矽薄膜超晶格等效熱傳導係數與幾何之關係，先固定 L_{Si} 之值，再依薄膜所佔表面積百分比調整 L/L_{Si} 值，鍺/矽薄膜超晶格以 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 表達，其中 x 為鍺 Ge 在薄膜超晶格單位晶胞內所佔表之面積百分比，分別使用 $L_{\text{Si}}=10\text{nm}$ 、 50nm 、 100nm 、 400nm 、 500nm 、 700nm 、 1000nm 並測試 $x=0.1\sim 0.9$ ，結果如圖 4-7 所示，當 $L_{\text{Si}}=10\text{nm}$ 、 50nm 、 400nm 時，可發現當鍺薄膜所佔面積百分比越小，等效熱傳導係數越低，理論上鍺薄膜所佔表面積百分比越小代表矽含量越多，而矽的熱傳導率又較鍺來得佳，應該會得到有較高的熱傳導能力，但是由於結構尺度與平均自由徑相當，因此界面散射所造成的影響反而較大，所以等效熱傳導係數反而會較低，這是 Fourier 定律所無法預估出來的結果，由此可知界面密度才是影響熱傳導的重要參數，這亦是本文研究的動機之一，因為鍺薄膜所佔表面積百分比越小表示界面越多，界面密度越大，故散射的影響越大，所以熱傳導能力越差；而在 L_{Si} 尺寸超過 500nm 後，材料內部散射的影響逐漸比界面散射的影響來得大，當 $L_{\text{Si}}=1000\text{nm}$ 時，此時材料內部散射影響已較界面大，

故呈現出傳統複合材料的特性，即鍍薄膜所佔表面積百分比越小，矽薄膜所佔的比例升高，等效熱傳導係數亦越高，較符合 Fourier 定律所預估的結果。

4.2 線型超晶格結構

圖 4-8 為計算奈米線型(Nanowire)複合材料線型超晶格結構的示意圖，線型超晶格之組成形式為一種線材(Wire material)以週期性地排列嵌入在一基材(Host material)中。在分析問題時，可將線型超晶格視為二維之結構，使用二維聲子輻射方程(EPRT)為其主導方程，為了與緊密型(Nanocompacted)結構做比較，故單位晶胞(Unit cell)內的鍍/矽所佔的比例必須相同，所以在鍍/矽分別佔 50%的情況下， $L = \sqrt{2} L_w$ ，因而線型的單位晶胞也會較緊密型的單位晶胞小約 $\sqrt{2}$ 倍。問題設定為鍍/矽線型超晶格(鍍為基材、矽為線材)，圖 4-9 為線型單位晶胞之聲子傳播方向與計算區域的邊界和界面條件示意圖。首先測試隱式迎風算則在模型中的格點收斂情況，計算區域寬度為 $L = \sqrt{2} L_w$ 來測試，矽線之寬度為 $L_w = 1\text{nm}$ ，鍍薄膜所佔面積百分比為 0.5 ($L = \sqrt{2} L_w$)，單位晶胞兩側的溫度差固定為 1K (300K ~ 301K)，邊界條件設定根據文獻 [32]，在 x 方向邊界條件設為週期性邊界，y 方向設為鏡射邊界條件，兩種材料相鄰四周的界面條件設為 IDMM。在空間格點上，x 方向($x = 0 \sim 1$)使用均勻格點，格點數以 150 個格點來測試，y 方向($y = 0 \sim 1$)之格點數亦均勻分布 150 個，x 之餘弦 μ 方向($\mu = -1 \sim +1$)分別使用 24、40、48、56 和 72 個 Gauss-Legendre 座標點， ϕ 方向($\phi = 0 \sim \pi$)使用 8、16、24、32、40、48、56、64、72、80、88、96 個 Gauss-Legendre 座標點，CFL 值設為 100，達穩態之條件設為與溫度最大相對誤差小於 10^{-6} 。測試結果如圖 4-10 所示。方向數 $(\mu, \phi) = (48, 48)$ 與 $(\mu, \phi) = (72, 96)$ 所得到之等效熱傳導係數相對誤差小於 5%，穩態溫度分布之最大相對誤差亦小於 5%，故本例的隱式迎風算則之計算接設定為 $(\mu, \phi) = (48, 48)$ 。由於本文數值計算未採用平行計算，故

在 x 之餘弦 μ 方向之 Gauss-Legendre 座標點數僅能取到 72，再更高的 Gauss-Legendre 座標點數須求助於更高階的電腦運算。

計算鍺/矽線型超晶格等效熱傳導係數與尺寸之關係，固定鍺薄膜所佔面積百分比為 0.5 ($L/L_w = \sqrt{2}$)，改變 L_w 值從 10nm 到 1000nm。圖 4-11(a)(b)(c) 為 $L_w=10\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、 x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，可發現在基材中靠近界面的左、右兩側，有曲線翹起高於或低於邊界溫度之情形發生，此為聲子粒子特性之表現，線材阻擋聲子行進之運動，造成在界面之前聲子能量的累積、界面之後接收不到聲子能量，因此界面的溫度不連續現象非常明顯，而 x 方向熱通量顯示聲子傳輸之路徑，線材明顯地阻礙了聲子的傳輸行為。圖 4-12(a)(b)(c) 為 $L_w=100\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、 x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，基材中界面兩側之溫升與溫降已逐漸消失，界面之溫度不連續變得較小一些，而 x 方向熱通量顯示聲子傳輸之路徑，線材雖然亦阻礙聲子的傳輸，但是材料內部開始有些微擴射現象發生。圖 4-13(a)(b)(c) 為 $L_w=1000\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、 x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，界面之溫度不連續更小，且各材料內部之溫度分布已接近斜直線，而 x 方向熱通量顯示聲子傳輸的路徑主要經由矽線材來傳遞，由於矽塊材的熱傳導能力比鍺佳，可知隨著線材尺寸變大，材料內部散射漸漸增加時，聲子傳輸行為漸接近擴散行為，傳輸路徑開始由材料熱傳導能力來主導。

圖 4-14 為等效熱傳導係數與薄膜尺寸之關係圖，由 1nm~1000nm 計算的熱傳導率，可發現尺寸效應所造成熱傳導能力大幅下降，然而隨著尺寸的增加，熱傳導率也越來越高。

接著測試鍺/矽線型超晶格等效熱傳導係數與幾何之關係，先固定 L_w 之值，依鍺薄材料所佔面積百分比調整 L/L_w ，鍺/矽線型超晶格以 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 表達，其中 x 為鍺薄膜在單位晶胞中所佔之面積百分比，使用 $L_w=10\text{nm}$ 、 50nm 、 100nm 、 400nm 、 500nm 、 700nm 、 1000nm 並分別測試 $x=0.1\sim 0.9$ ，結果如圖 4-15 所示，

當 $L_w=10\text{nm}$ 、 50nm 、 400nm 時，可發現鍍薄膜所佔表面積百分比越小，等效熱傳導係數越低，此結果非使用 Fourier 定律可預估的，顯示在這些尺度時，線材界面對於傳輸行為仍具較大的影響。而從 $L_w = 700\text{nm}$ 之後，隨著線材的尺寸增加，材料內部散射影響逐漸比界面大，始呈現出傳統複合材料的特性，矽薄膜佔的比例升高，等效熱傳導係數越高，符合 Fourier 定律預估的結果。

4.3 緊密型超晶格結構

圖 4-16 為計算緊密堆疊型超晶格結構之熱傳導性質之示意圖，其單位晶胞可有(a)(b)兩種型式，本文為了與線型超晶格結構做比較，故採取(b)類型矽材在中間為例做計算模擬，緊密堆疊型超晶格之組成形式為兩種線材(Wire material)以週期性且棋盤式的緊密堆疊在一起。分析問題時，緊密型超晶格亦視為二維結構，使用二維聲子輻射方程為其主導方程，問題之設定為在單元晶胞 x 方向兩側固定一溫度差 1K ($300\text{K}\sim 301\text{K}$)，邊界條件方面根據文獻 [29]，在 x 方向及 y 方向上皆與設定為週期性邊界條件，材料間之界面條件使用 IDMM，圖 4-17 為依聲子傳播方向之計算區域邊界和界面示意圖。首先測試格點收斂情形，

首先測試隱式迎風算則在模型中的格點收斂情況，計算區域寬度為 $L = 2L_w$ 來測試，矽線之寬度為 $L_w = 1\text{nm}$ ，鍍薄膜所佔面積百分比為 $0.5(L = 2L_w)$ ，空間格點數在 x 方向($x = 0 \sim 1$)均勻分布 100 個格點，y 方向($y = 0 \sim 1$)亦均勻分布 100 個格點，x 之餘弦 μ 方向($\mu = -1 \sim +1$)使用 Gauss-Legendre 座標點， ϕ 方向($\phi = 0 \sim \pi$)使用 Gauss-Legendre 座標點，時間步設定為 $CFL=100$ ，矽線之寬度為 $L_w = 1\text{nm}$ ，達穩態之條件為溫度最大相對誤差小於 10^{-6} ，測試情形如圖 4-18 所示。方向數 $(\mu, \phi) = (48, 64)$ 和 $(\mu, \phi) = (96, 80)$ 所得到之相對誤差小於 0.02%，穩態溫度分布之最大相對誤差小於 0.04%，故本例隱式迎風算則的計算皆設定方向數 $(\mu, \phi) = (48, 56)$ 來做運算。

計算鍍/矽緊密型超晶格等效熱傳導係數與尺寸之關係，固定鍍薄膜所佔表

面積百分比為 0.5 ($L/L_w = 2$)， L_w 值從 10nm ~ 1000nm。圖 4-19(a)(b)(c)分別為 $L_w = 10\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，可發現不同於線型超晶格的溫度分布圖，在界面兩側的地方，不再出現高於或低於邊界溫度之情形，這是因為材料的不連續相，界面阻擋聲子之運動，因此界面的溫度不連續非常明顯，由 x 方向熱通量顯示聲子傳輸之路徑，明顯地看出界面阻礙聲子的傳輸。圖 4-20(a)(b)(c)為 $L_w = 100\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，基材中界面兩側亦沒有溫升或溫降的現象，不過界面的溫度不連續有變得較小，而 x 方向熱通量顯示聲子傳輸之路徑，材料界面仍然阻礙聲子的傳輸。圖 4-21(a)(b)(c)為 $L_w = 1000\text{nm}$ 之穩態無因次溫度、溫度剖面圖、x 方向熱通量圖，由溫度分布或溫度剖面，界面之溫度不連續更小，且溫度分布已接近斜直線，而因為矽的熱傳導能力比較佳，因此溫度梯度較鉅平緩，x 方向熱通量顯示，材料內部散射漸漸增加，聲子傳輸行為漸接近擴散行為，但是界面仍然對聲子傳輸有影響存在。

接著，比較在特徵尺度為 $L_w = 10\text{nm}$ 時，鍺原子面積百分比為 0.5 之薄膜超晶格、線型超晶格、緊密型超晶格的等效熱傳導係數，分別為 2.793、2.893、1.938W/mK；緊密型超晶格之熱傳導能力分別較薄膜超晶格和線型超晶格下降 30.6%和 33.1%。雖然與文獻中[29]所提及的，緊密型會比線型等效熱傳導率會低約 50%有些差距，但是仍可看出，由於緊密型的界面數量比線型多出許多，故等效熱傳導率至少會下降 30%以上。

接著與[29]中，Tian, W. & Yang, R. [29] 使用直接蒙地卡羅法 (Direct Monte Carlo method, DSMC)所模擬出的結果做誤差比較，圖 4-22 ~圖 4-24 為本文模擬數據與 Tian, W. & Yang, R. [29] 所做的圖形數據的比較，其中分別比較 3nm，12nm，24nm，48nm，96nm，192nm 點在 300K、500K、800K 的數據。表 4-1~表 4-4 為模擬數據比較與誤差比較。

可看出線型的模擬與 DSMC 所做的模擬相差甚多，由於本文中所使用的聲子界面穿透率是採用 Chen, 1998 [4] 所提出的條件，與 Tian, W. & Yang, R. [29]

採用的界面穿透率是採用 Dames, 2004 [10] 不盡相同，所以可能造成的誤差，且本文在線型的模擬中，程式的收斂性不是極佳，也有可能造成模擬結果產生極大誤差的原因之一。而在緊密型方面，與 DSMC 的誤差就明顯小了許多，模擬結果也較符合，誤差約在 2% 以內。而根據文獻[13]，在計算線型複合材料方面，BTE 與 MC (Monte Carlo Method) 的計算本身就會存在些誤差，在文獻[13]中的 Fig.6 顯示，在 10nm 及 50nm 時，兩種計算方法得到的結果會相差約在 8% 之內，圖 4-29 為本文模擬的結果與[13]中的 Fig.6 結果做比較，結果雖然有些誤差，不過大致上的趨勢是一樣的，即尺寸越小的情況下，由於界面散射的影響，錯所佔的比例越低反而熱傳導率越低，錯所佔比例升高後，熱傳導率反而逐漸升高，與圖 4-7，圖 4-15 圖形結果大致上吻合。



表 4-1 DSMC 與 DOM(BTE)線型模擬 300K~800K 的數據比較

溫度	300K	500K	800K	300K	500K	800K
計算方法	DSMC	DSMC	DSMC	DOM	DOM	DOM
Size(nm)	embedded	embedded	embedded	embedded	embedded	embedded
3	1.4869	1.3994	1.4925	0.9233	0.8246	0.8171
12	4.9506	4.6407	4.0476	3.4219	2.9471	2.8084
24	8.2661	7.5776	6.5736	6.3661	5.3208	4.9172
48	13.7327	11.9946	9.8463	11.4626	9.1941	8.1434
96	21.6940	17.2731	13.3266	19.7681	14.9702	12.4753
192	31.1968	22.6446	16.4551	32.1480	22.4617	17.3485

表 4-2 DSMC 與 DOM(BTE)線型模擬 300K~800K 的數據誤差比較

溫度	300K	500K	800K
Size(nm)	誤差(%)	誤差(%)	誤差(%)
3	37.90	41.07	45.14
12	30.88	36.49	30.62
24	22.99	29.78	25.20
48	16.53	23.35	17.29
96	8.88	13.33	6.39
192	3.05	0.81	5.43

表 4-3 DSMC 與 DOM(BTE)緊密型模擬 300K~800K 的數據比較

溫度	300K	500K	800K	300K	500K	800K
計算方法	DSMC	DSMC	DSMC	DOM	DOM	DOM
Size(nm)	compacted	compacted	compacted	compacted	compacted	compacted
3	0.5817	0.6164	0.6269	0.5910	0.6282	0.6386
12	2.2717	2.3870	2.3412	2.3154	2.4163	2.3852
24	4.4410	4.5224	4.3712	4.5083	4.5900	4.3873
48	8.4765	8.2823	7.5365	8.5732	8.3465	7.5860
96	15.4152	14.1022	12.0384	15.5910	14.1289	12.0920
192	26.3549	21.8021	16.9224	26.4042	21.9676	17.1698

表 4-4 DSMC 與 DOM(BTE)線型模擬 300K~800K 的數據誤差比較

溫度	300K	500K	800K
Size(nm)	誤差(%)	誤差(%)	誤差(%)
3	1.60	1.91	1.87
12	1.92	1.23	1.88
24	1.52	1.49	0.37
48	1.14	0.78	0.66
96	1.14	0.19	0.45
192	0.19	0.76	1.46

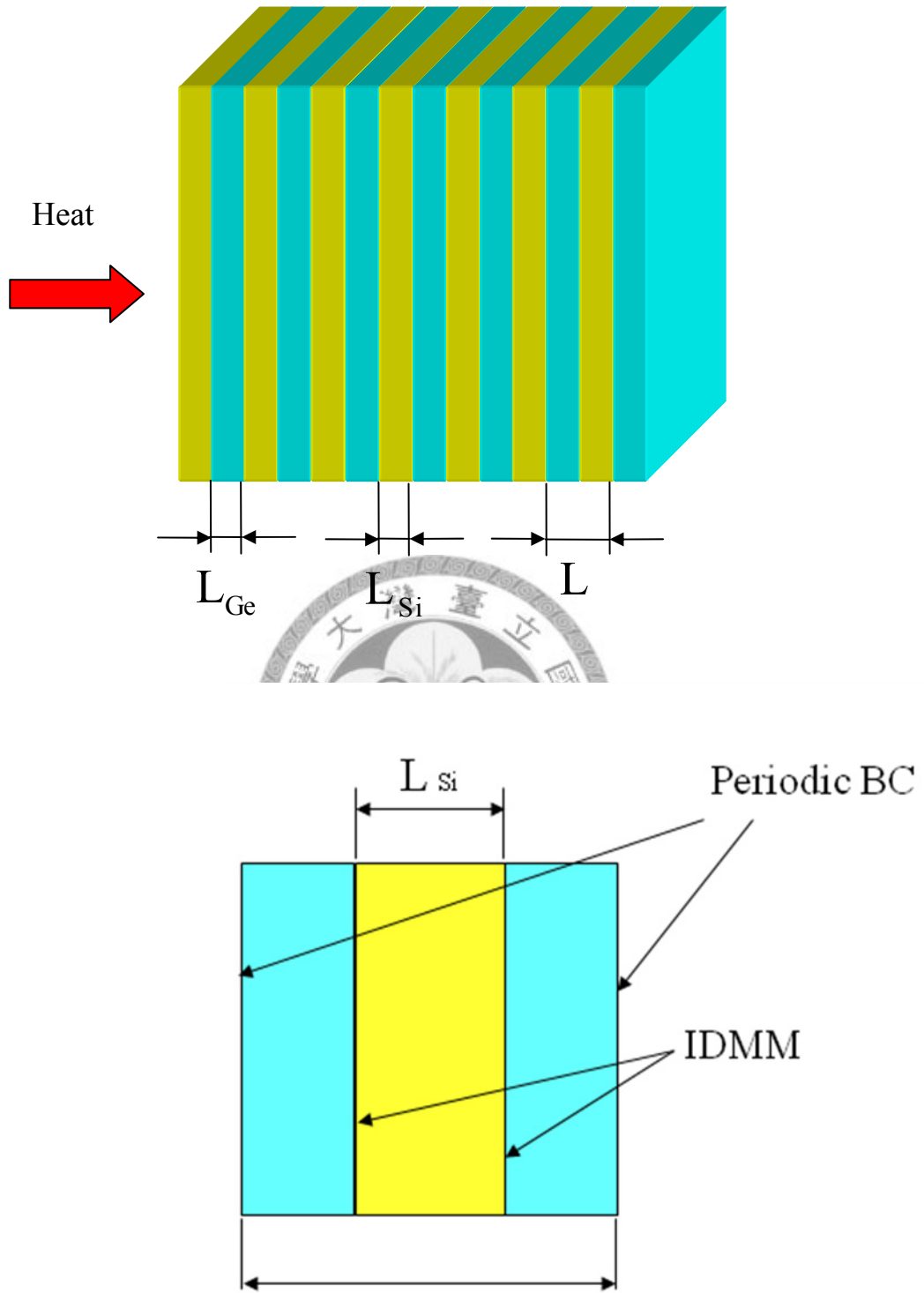


圖 4-1 薄膜超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖

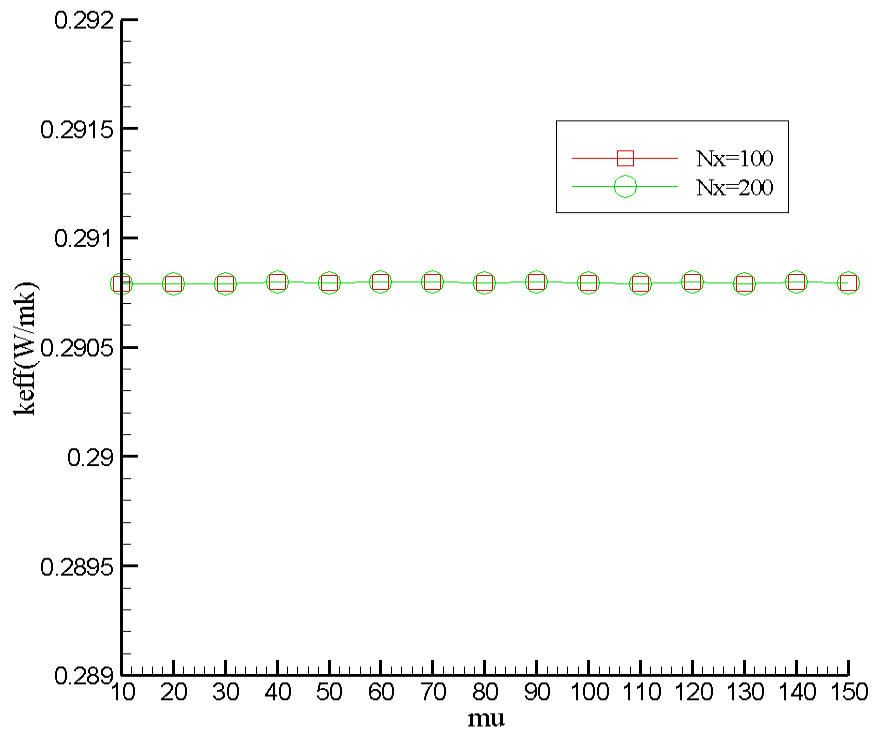
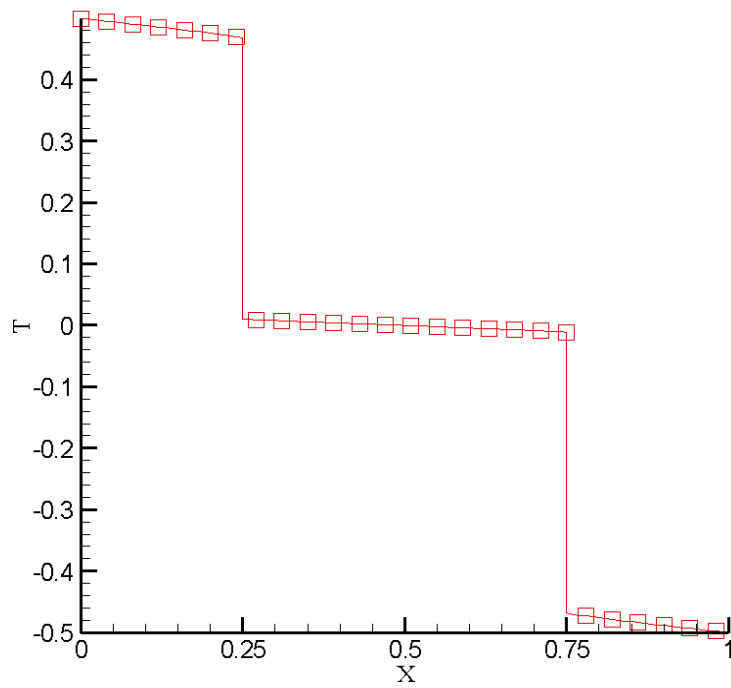


圖 4-2 鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 1\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 格點測試結果

(a)



(b)

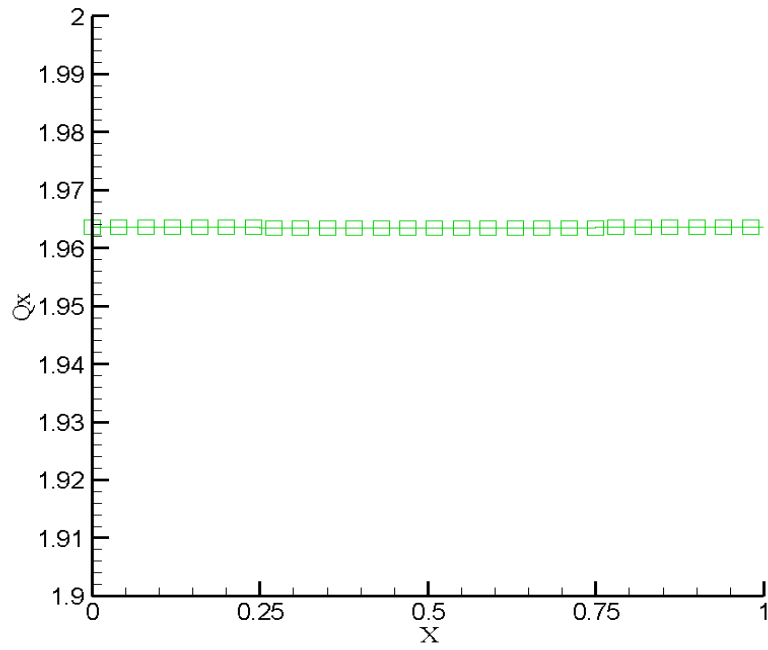
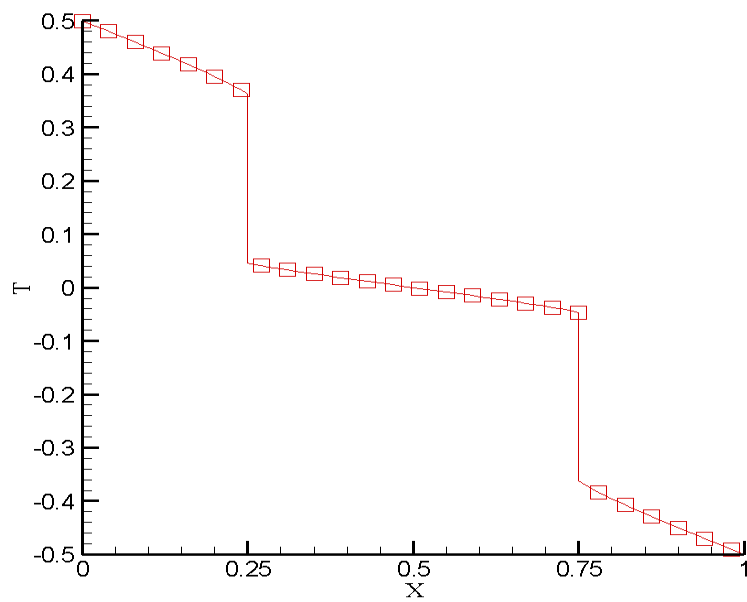


圖 4-3 鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 10\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 熱通量

(a)



(b)

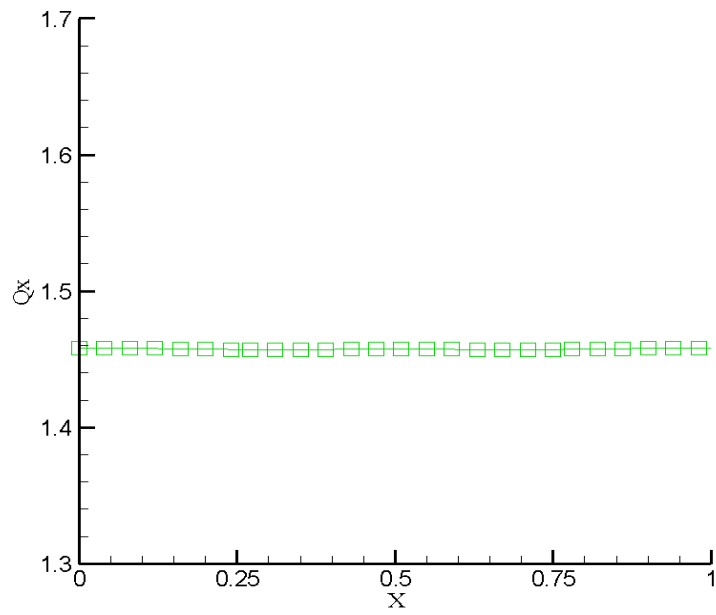
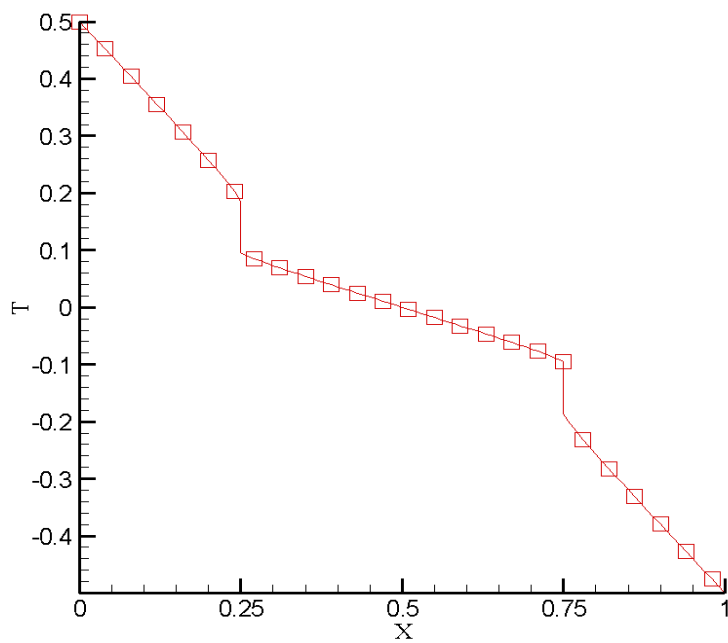


圖 4-4 鉻/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 100\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 熱通量。

(a)



(b)

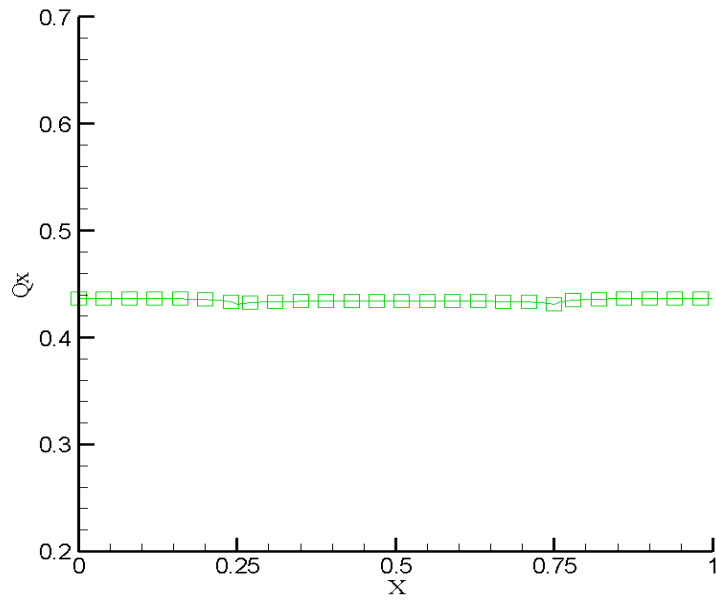


圖 4-5 鍺/矽薄膜超晶格 ($L_{Si} = 1000\text{nm}$, $L/L_{Si} = 2$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 熱通量

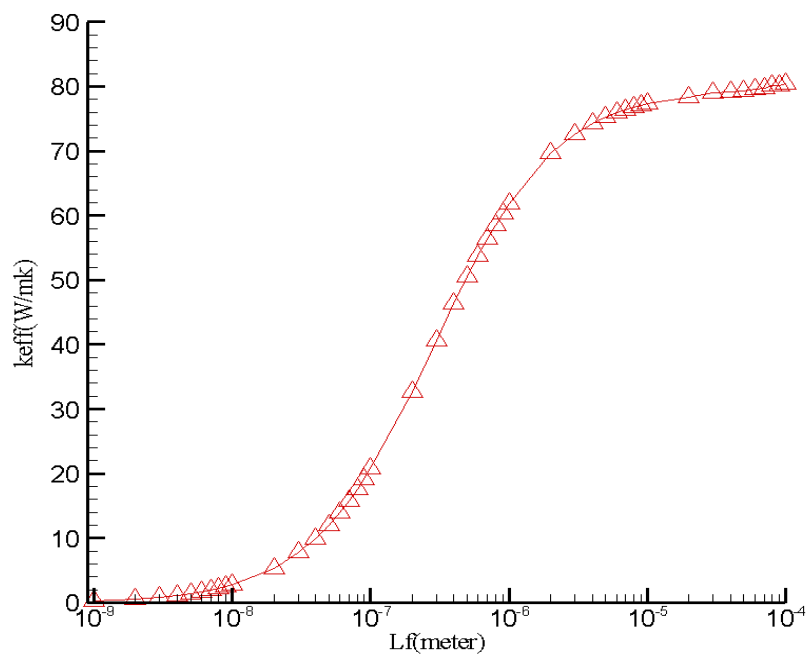


圖 4-6 鍺/矽薄膜超晶格 ($L/L_{Si} = 2$) 等效熱傳導係數何尺寸關係圖

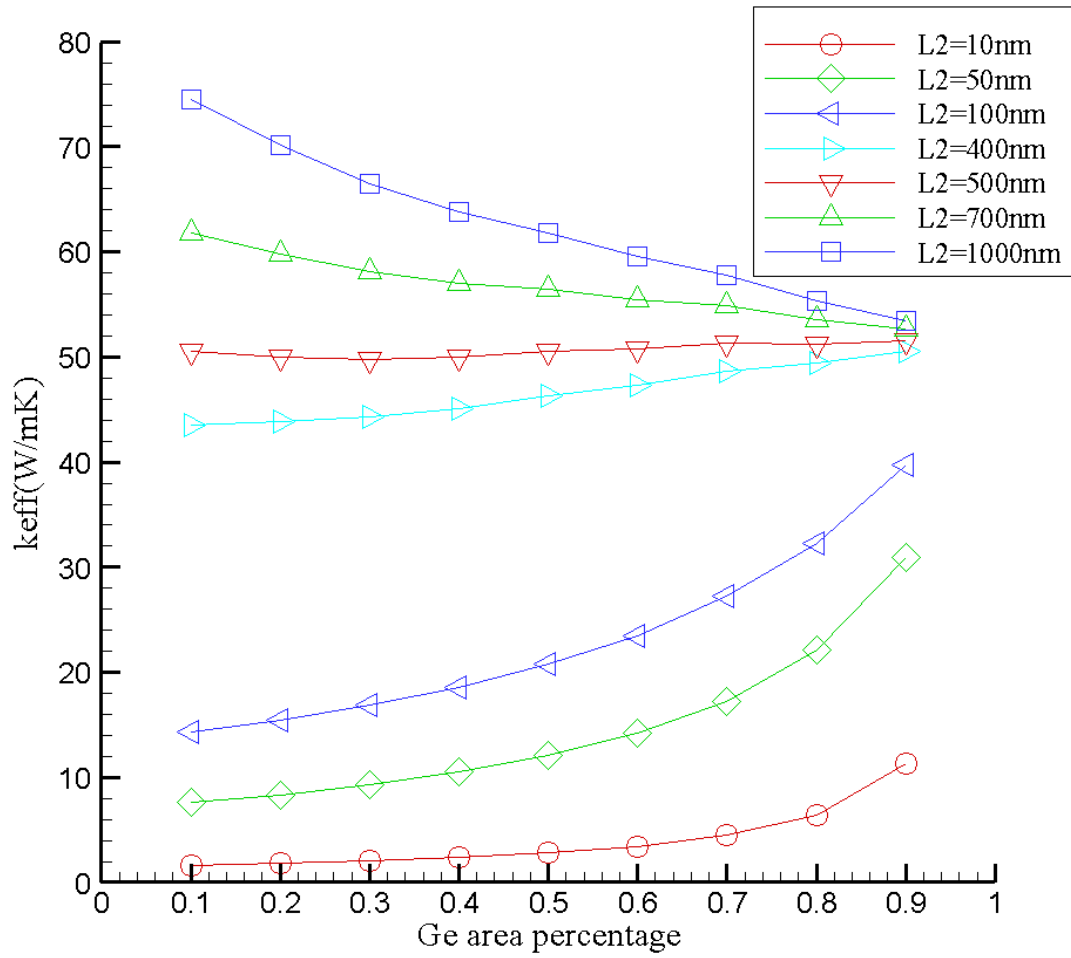


圖 4-7 鍺/矽薄膜超晶格等效熱傳導係數和界面面積百分比關係圖

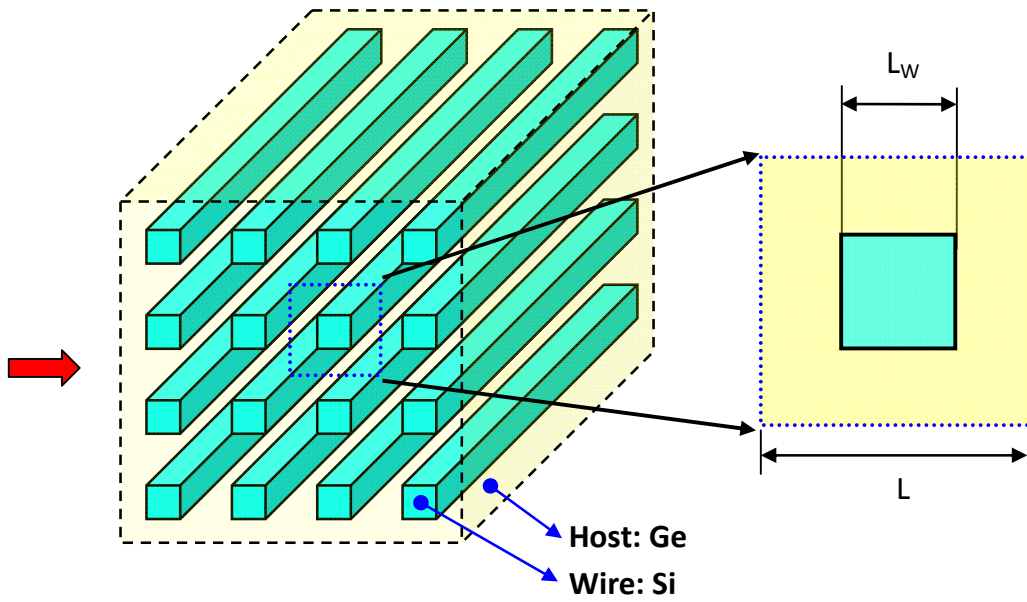


圖 4-8 線型超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖

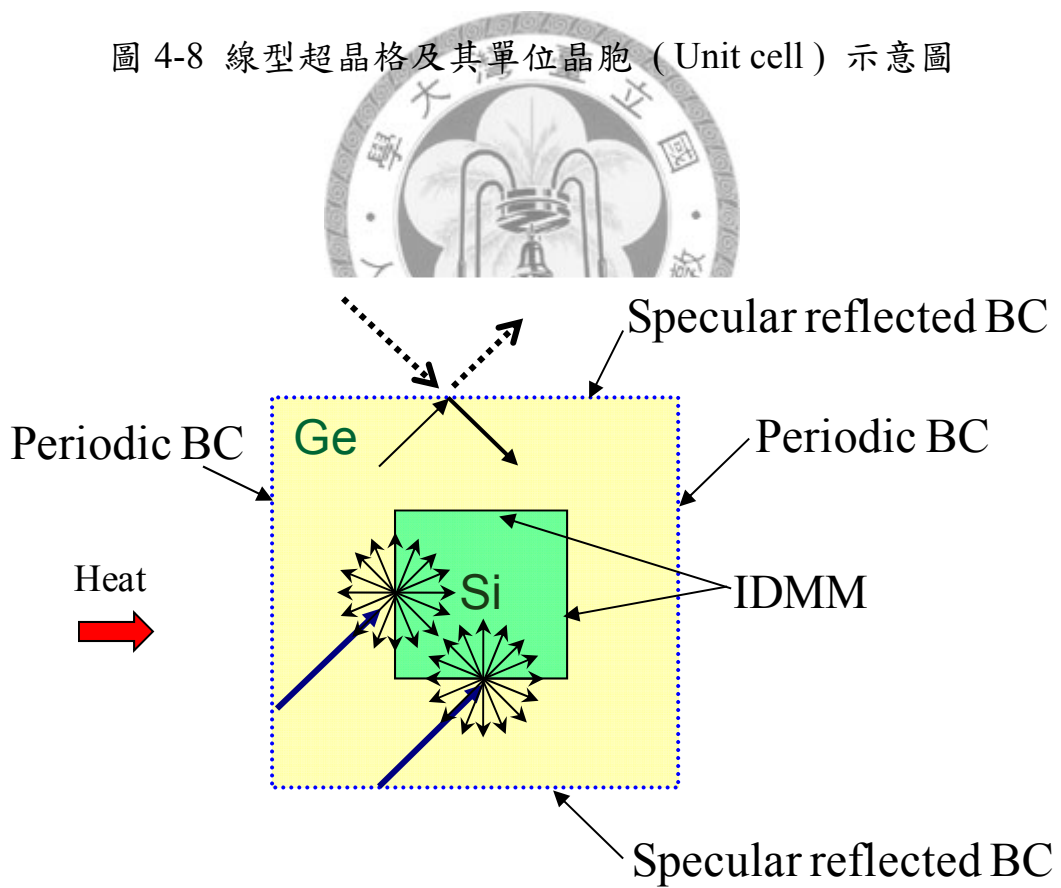


圖 4-9 線型超晶格單位晶胞 (Unit cell) 邊界條件示意圖

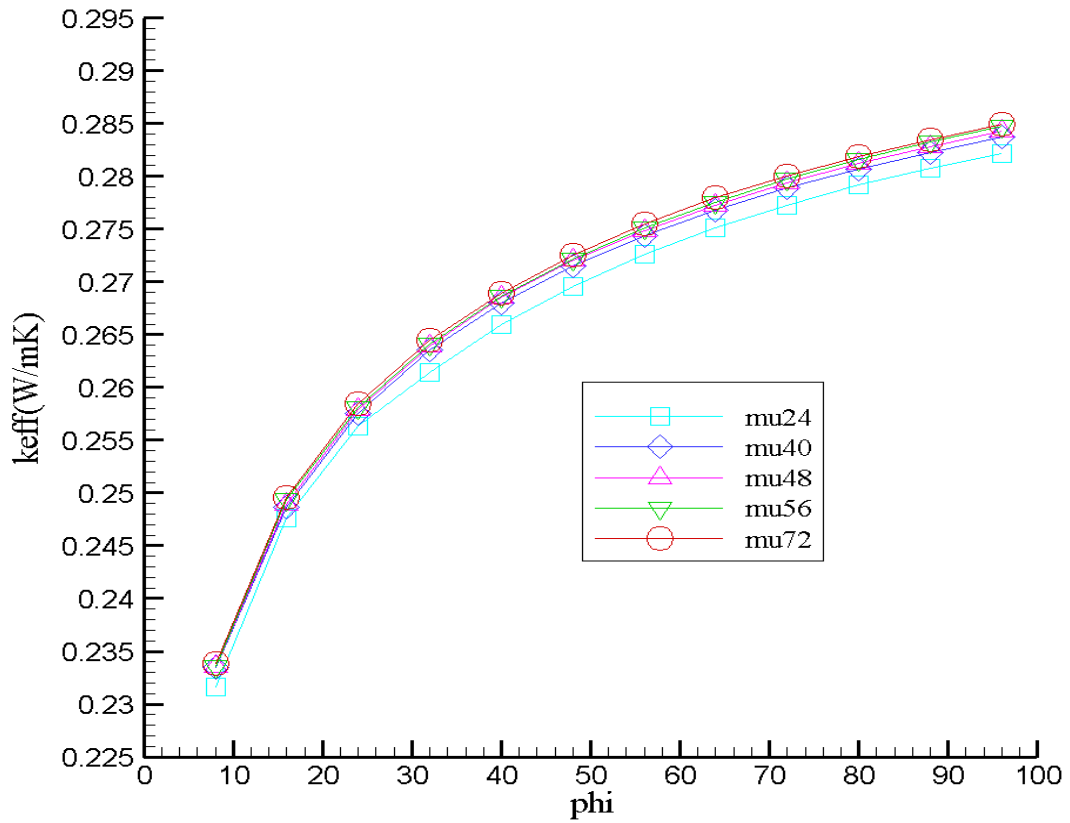
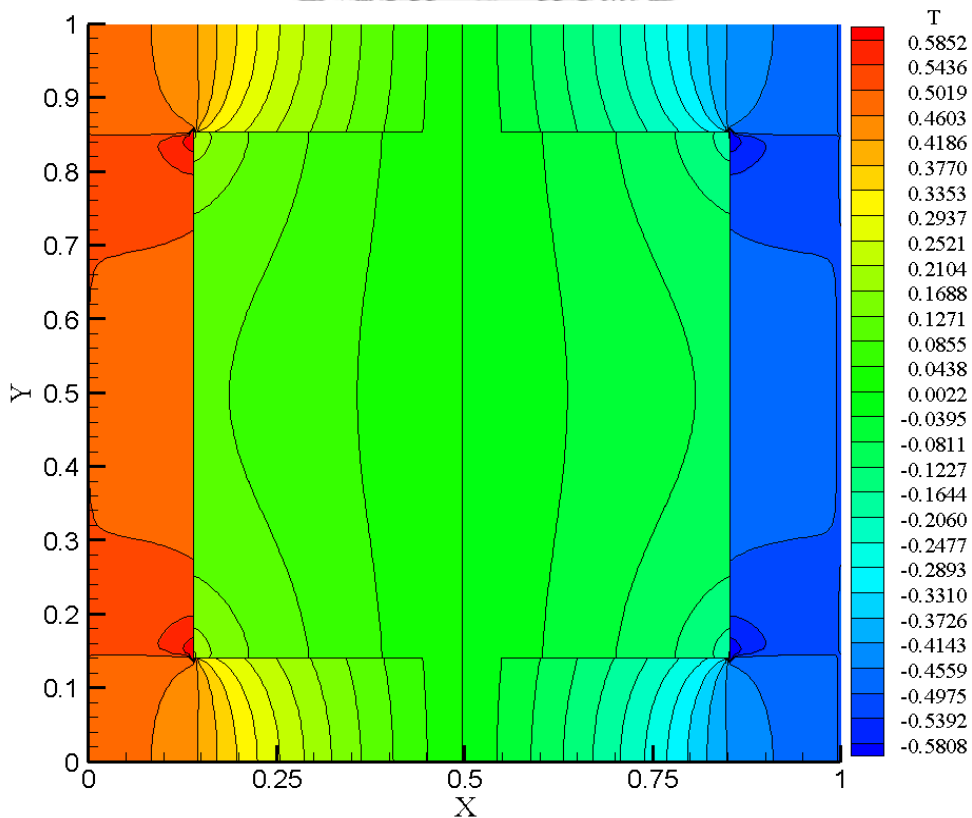
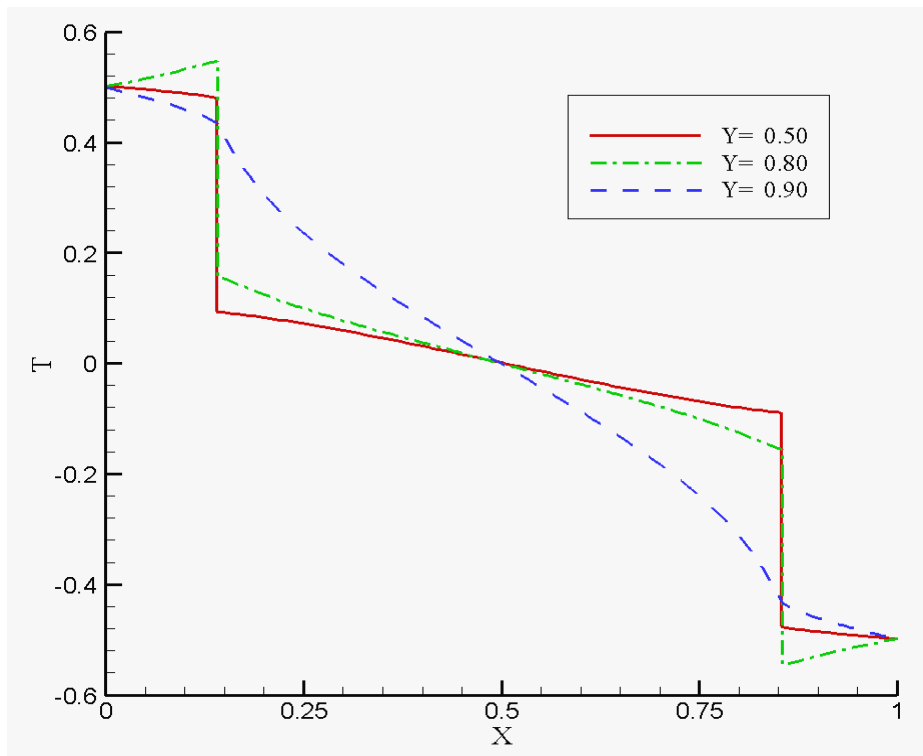


圖 4-10 線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w = 1\text{nm}$) 格點收斂測試圖

(a)



(b)



(c)

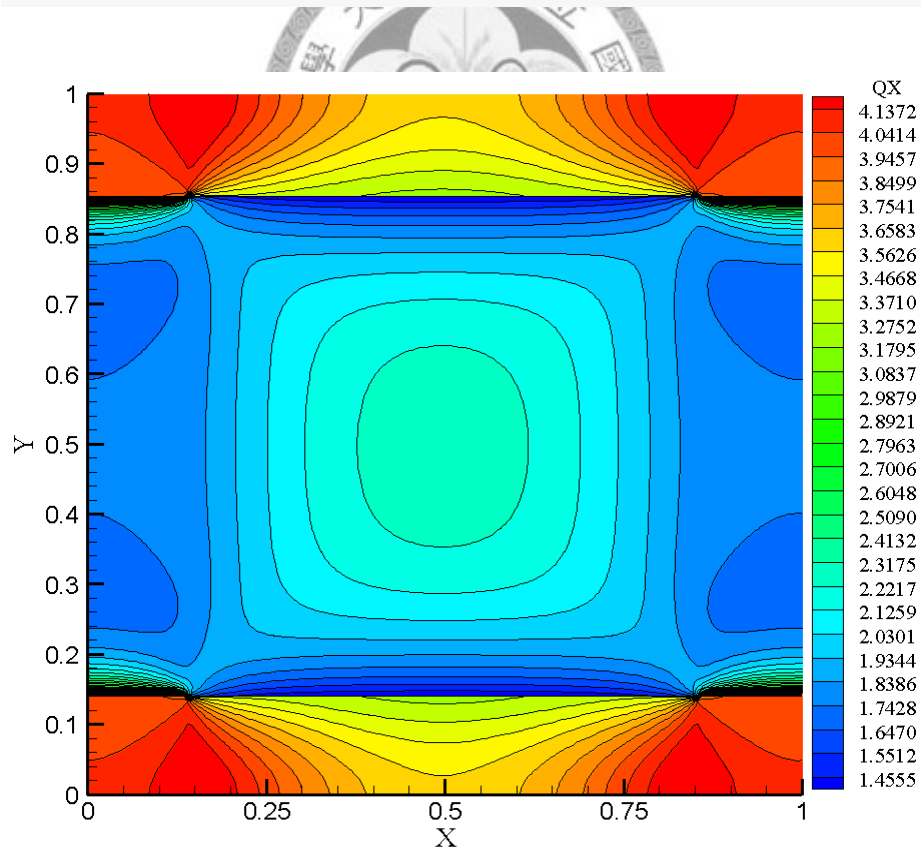
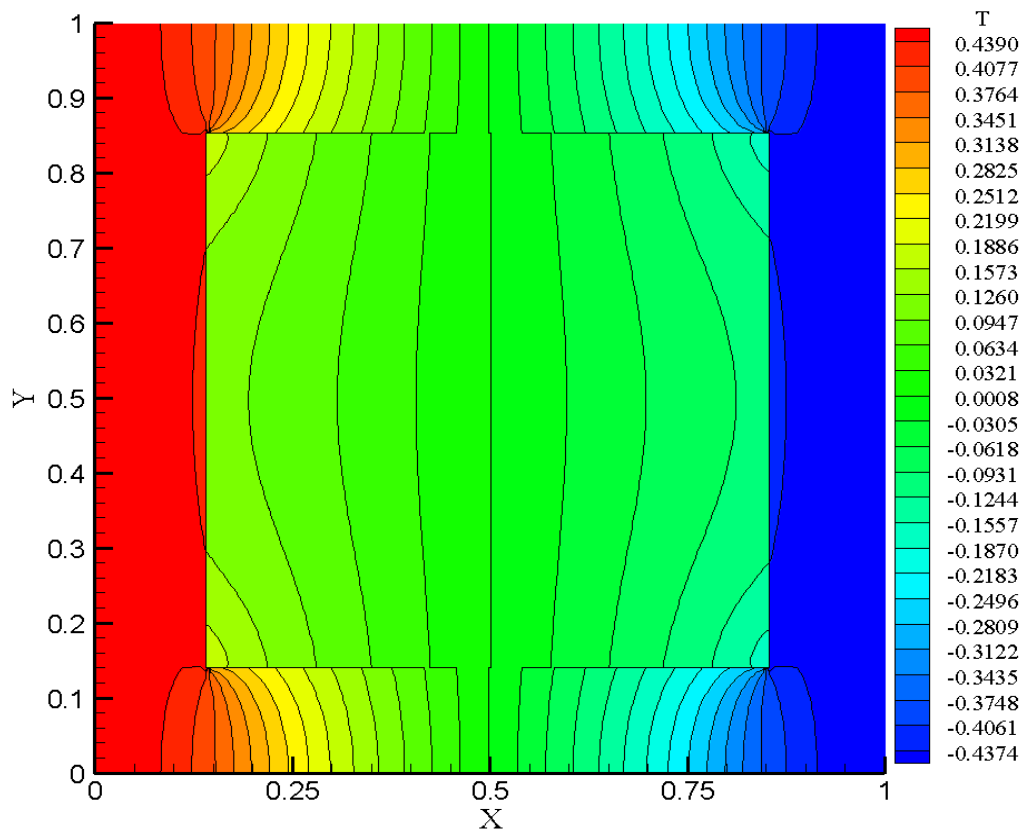


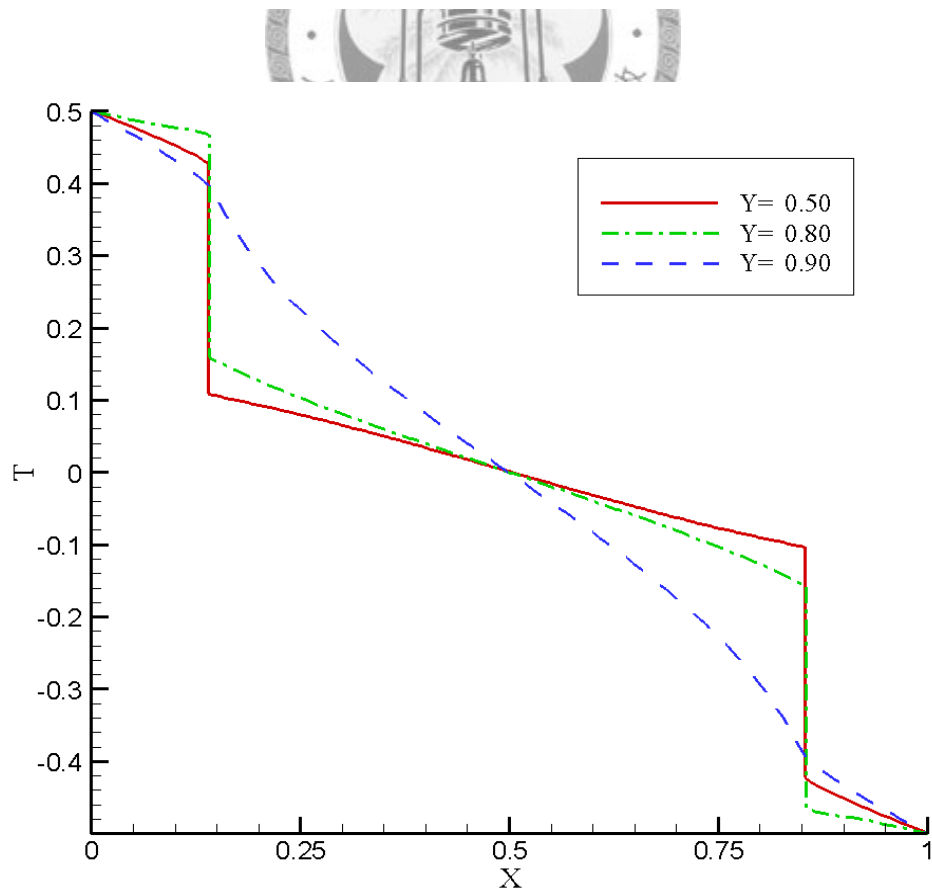
圖 4-11 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w = 10\text{nm}$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量

(a)



(b)



(c)

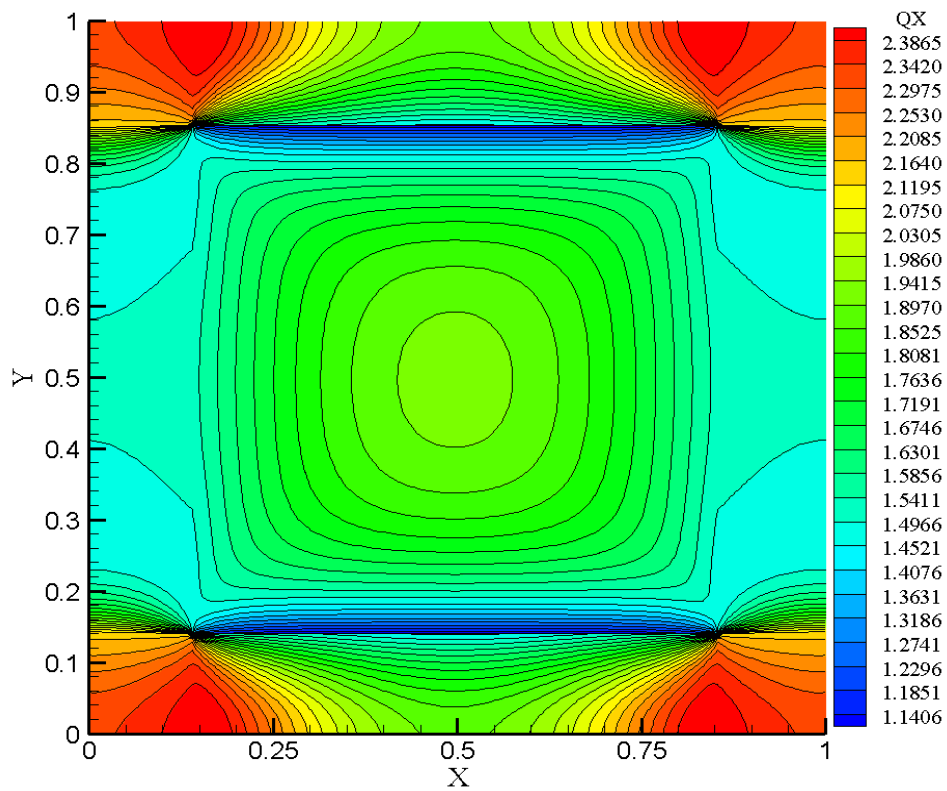
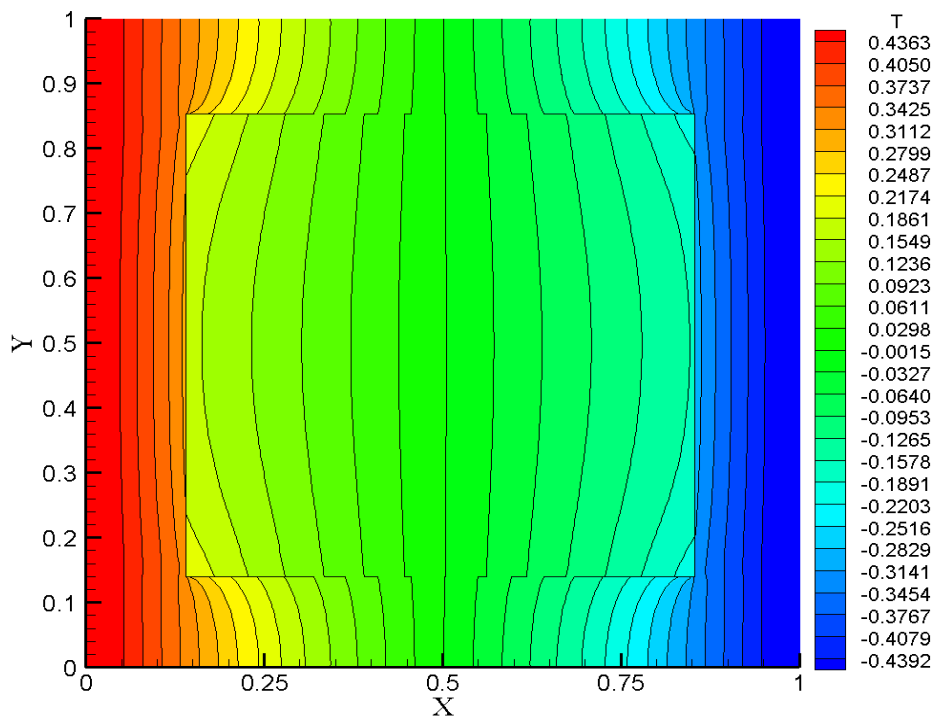


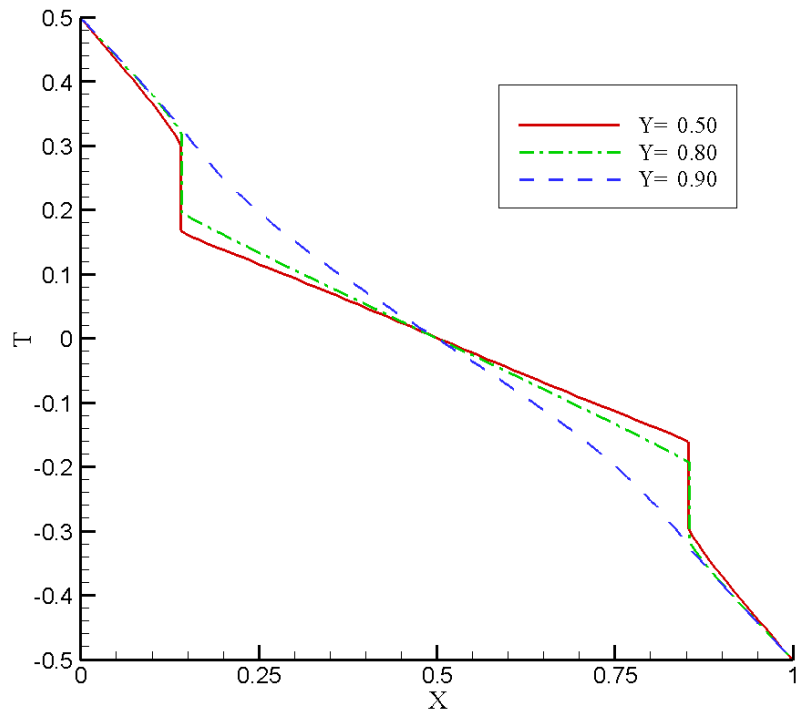
圖 4-12 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 100\text{nm}$) 穩態結果：

(a)溫度；(b) 溫度剖面圖；(c)x 方向熱通量

(a)



(b)



(c)

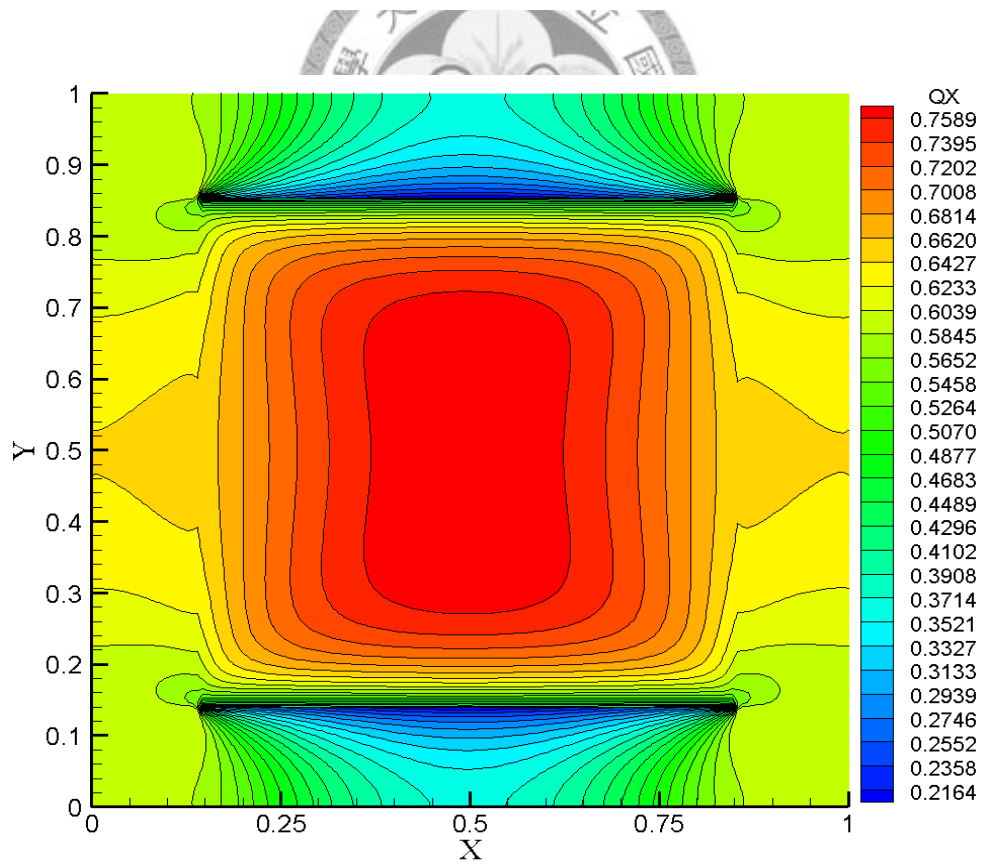


圖 4-13 鍺/矽線型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w=1000\text{nm}$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量

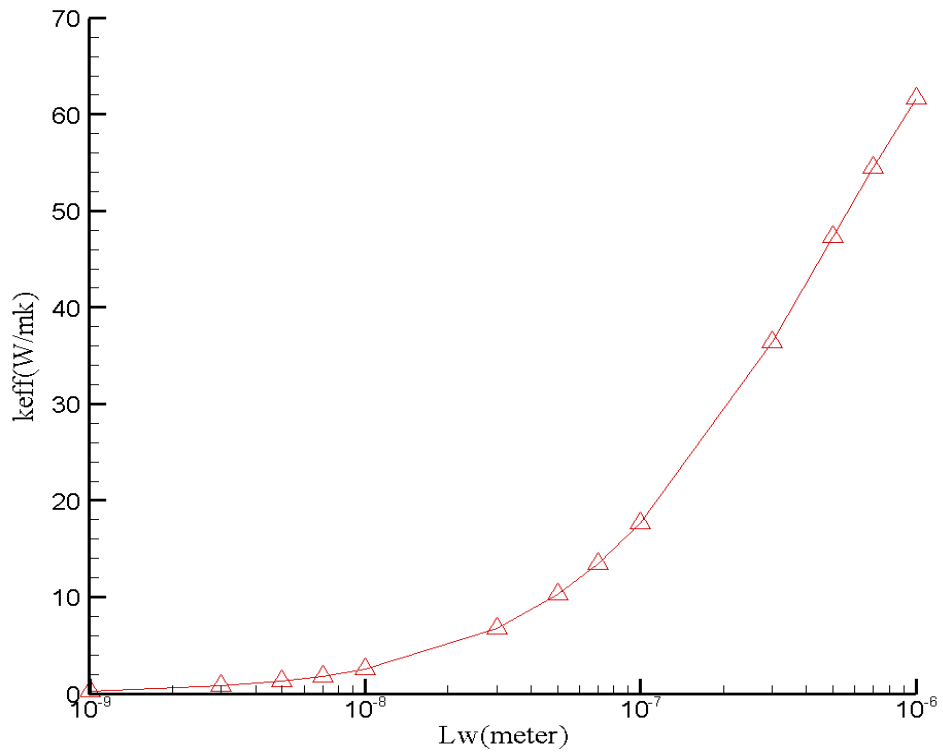


圖 4-14 鋅/矽線型超晶格 $L = \sqrt{2} L_w$ 等效熱傳導係數與尺寸關係圖

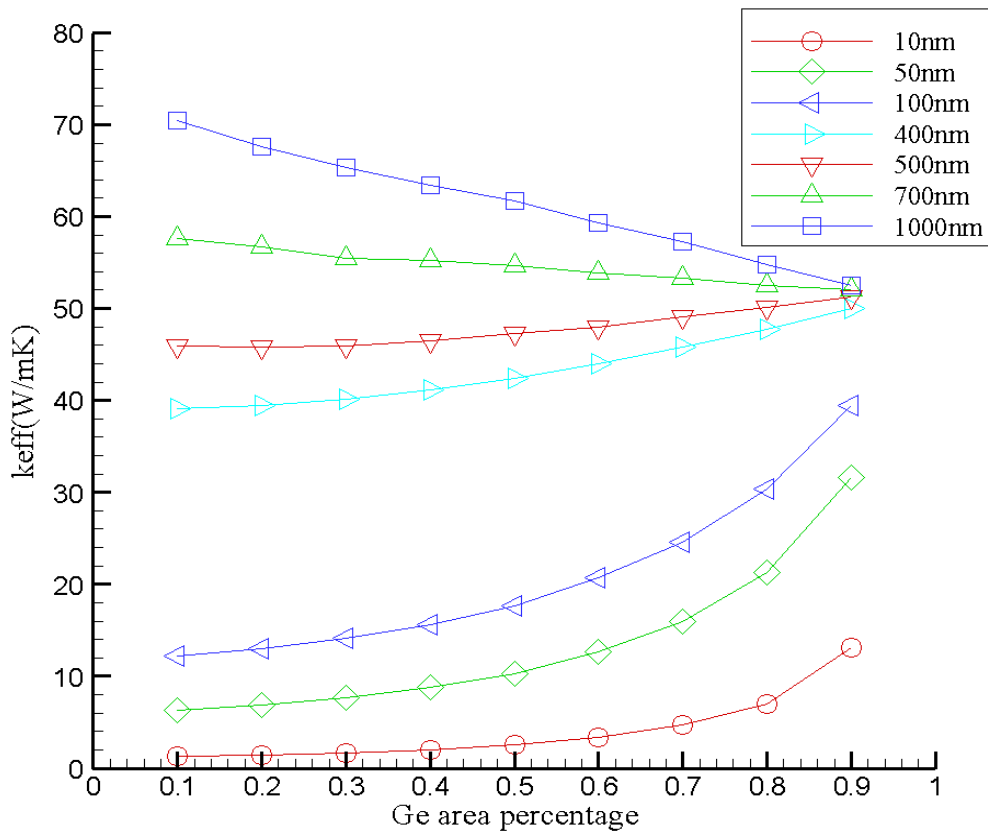


圖 4-15 鋅/矽線型超晶格等效熱傳導係數與表面積百分比關係圖

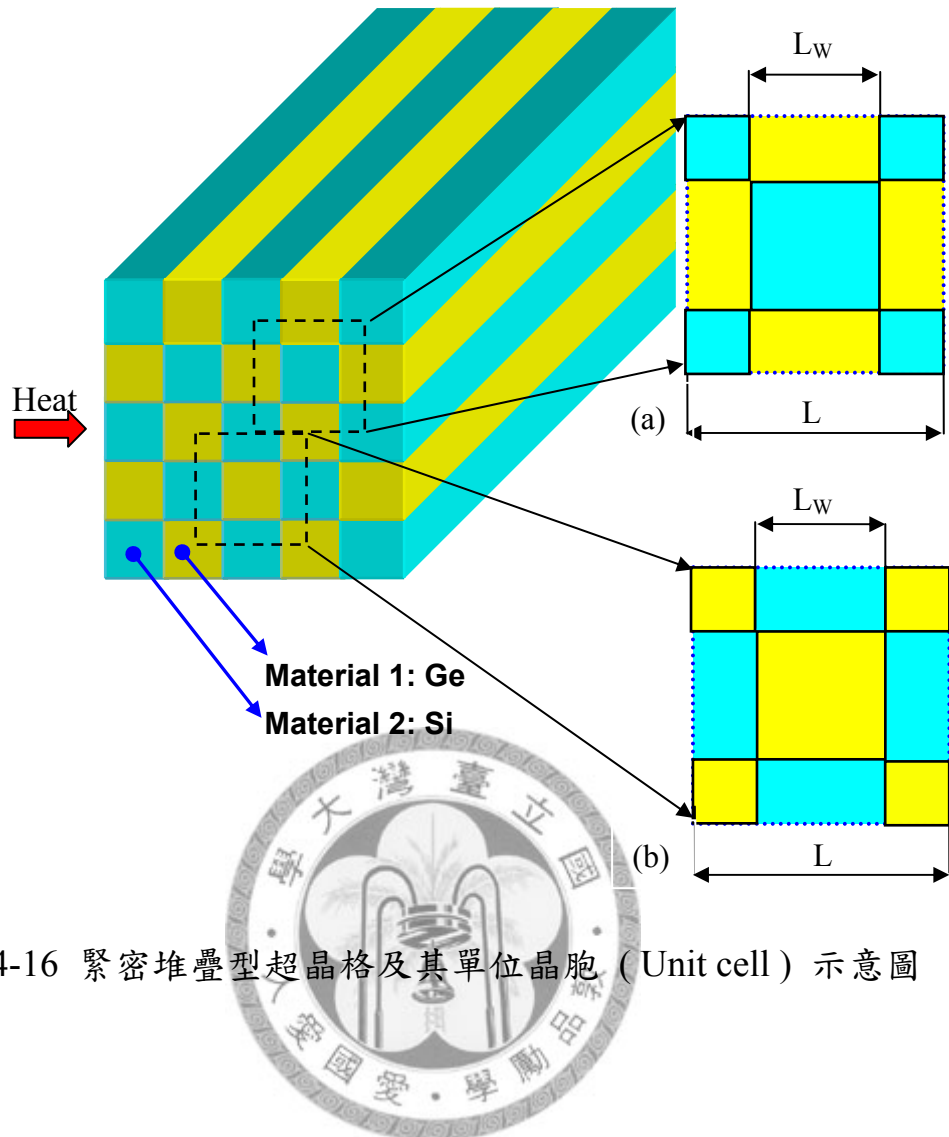


圖 4-16 緊密堆疊型超晶格及其單位晶胞 (Unit cell) 示意圖

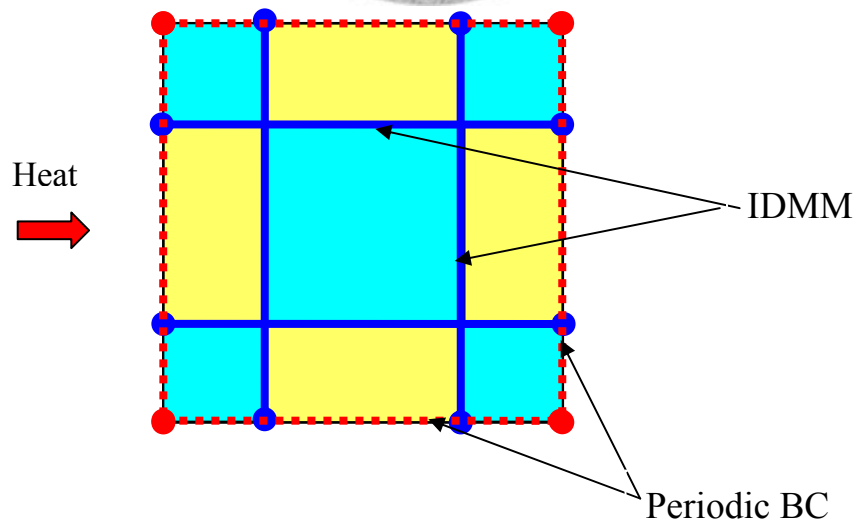


圖 4-17 緊密堆疊型超晶格單位晶胞 (Unit cell) 邊界條件示意圖

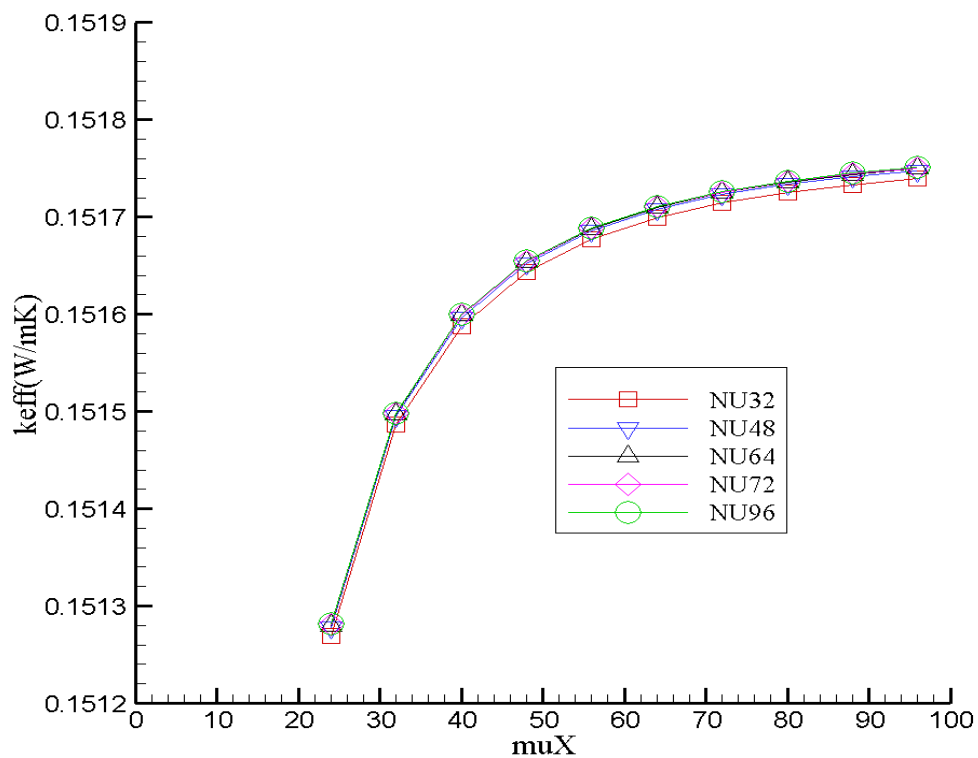
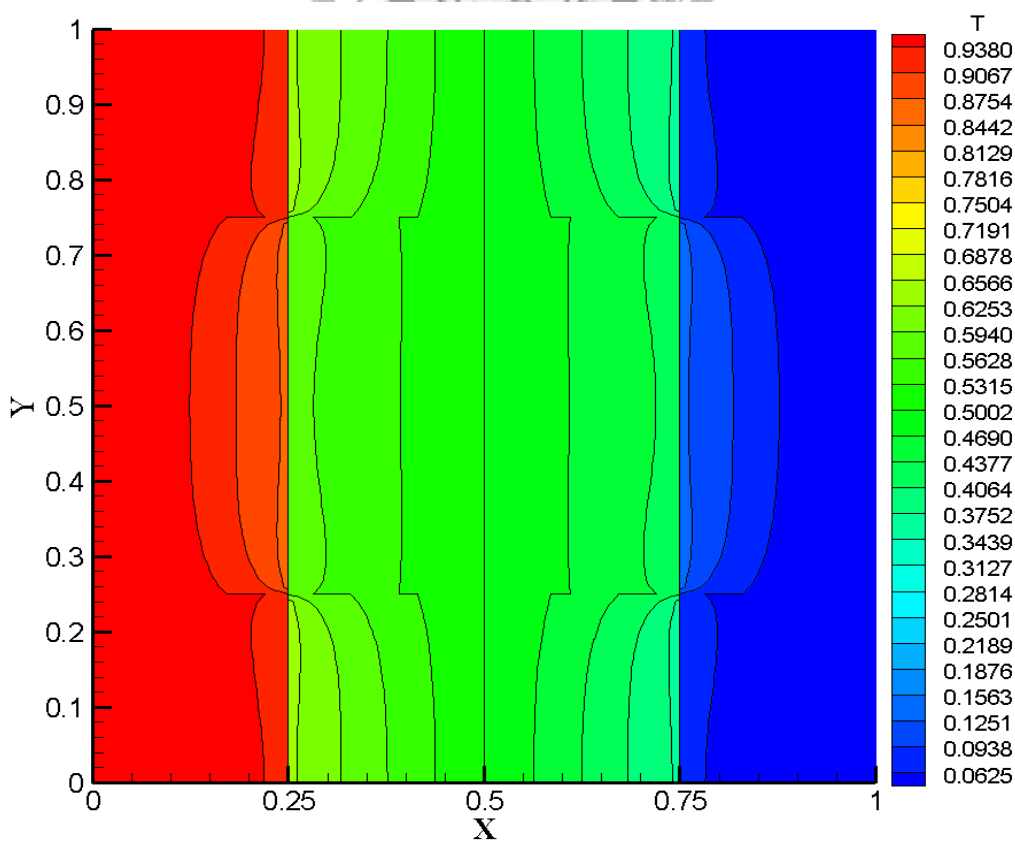
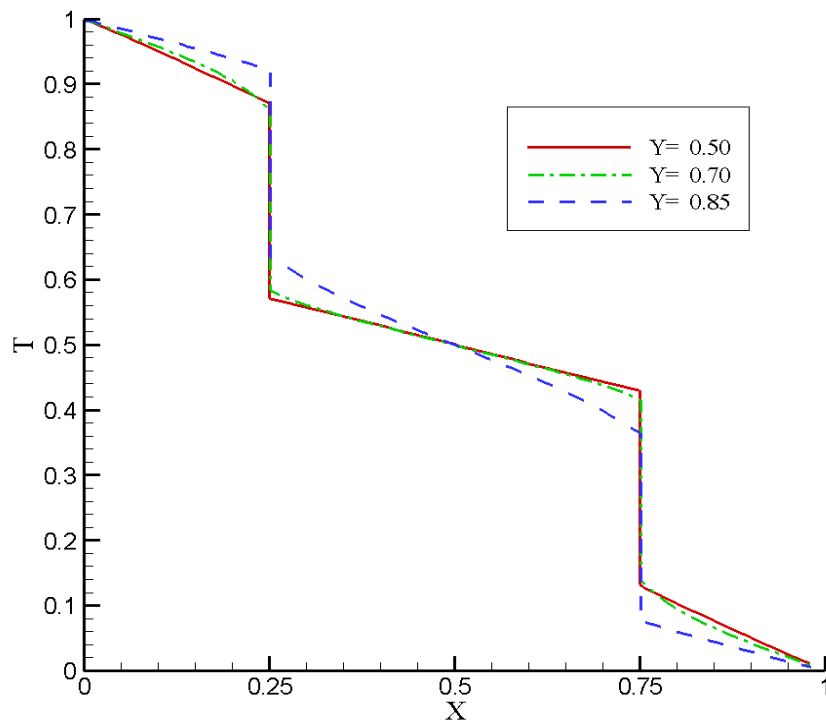


圖 4-18 鍺/矽緊密堆疊型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w = 1\text{nm}$) 格點收斂測試圖

(a)



(b)



(c)

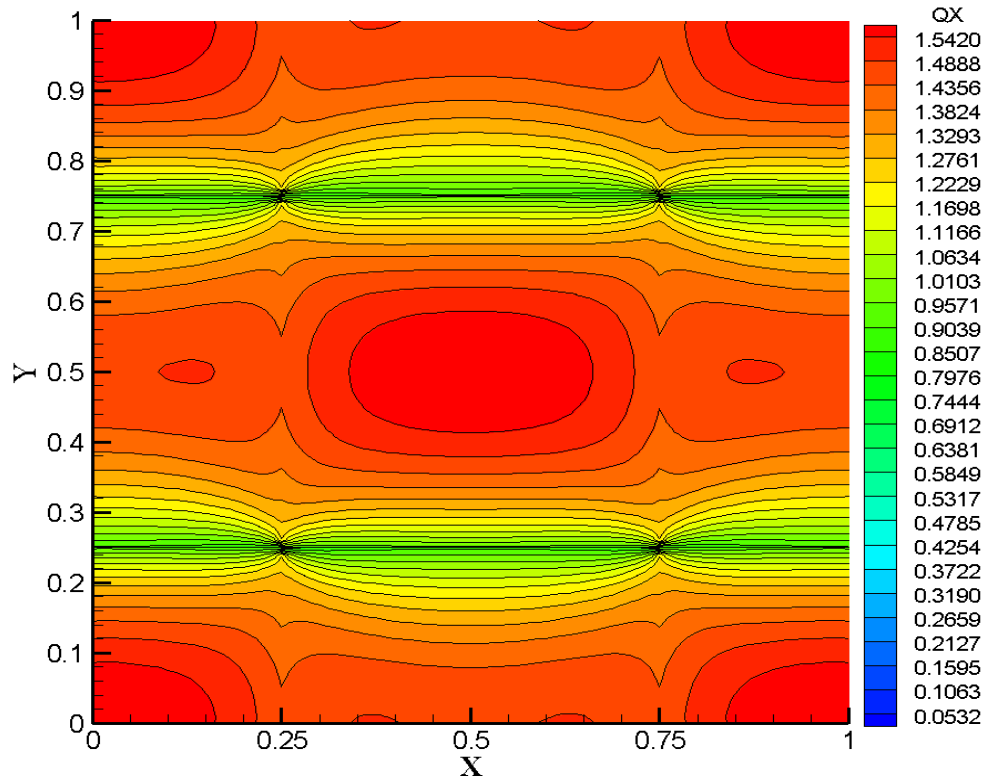
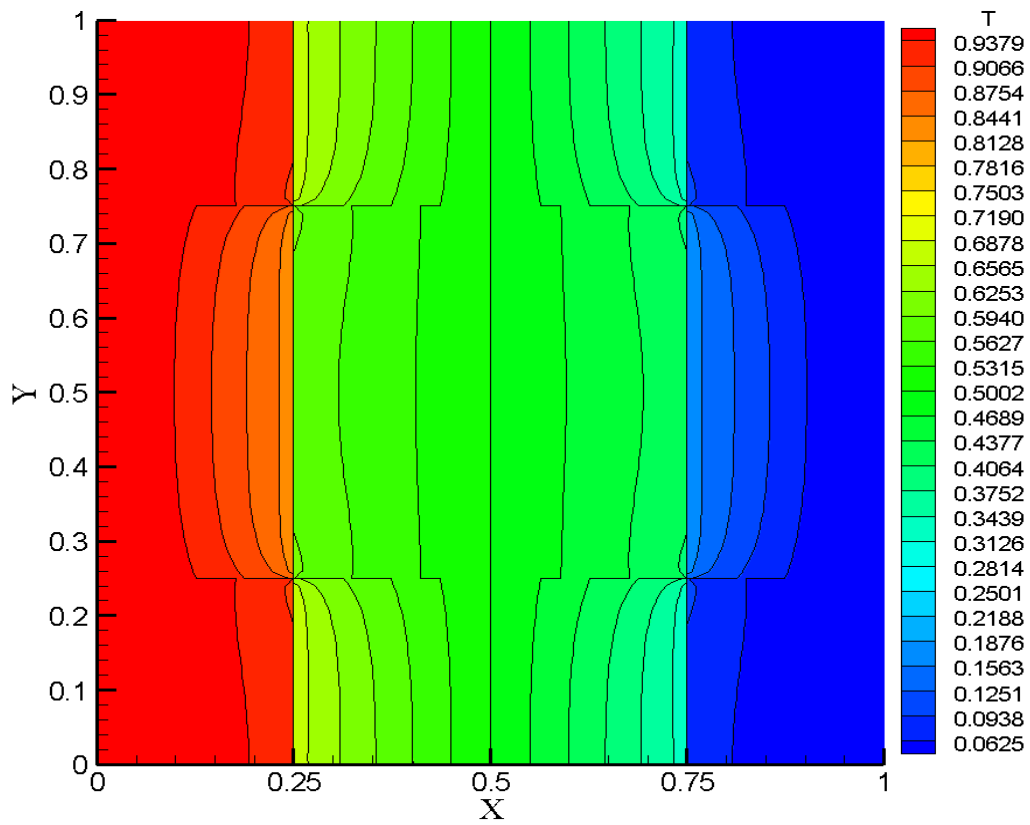


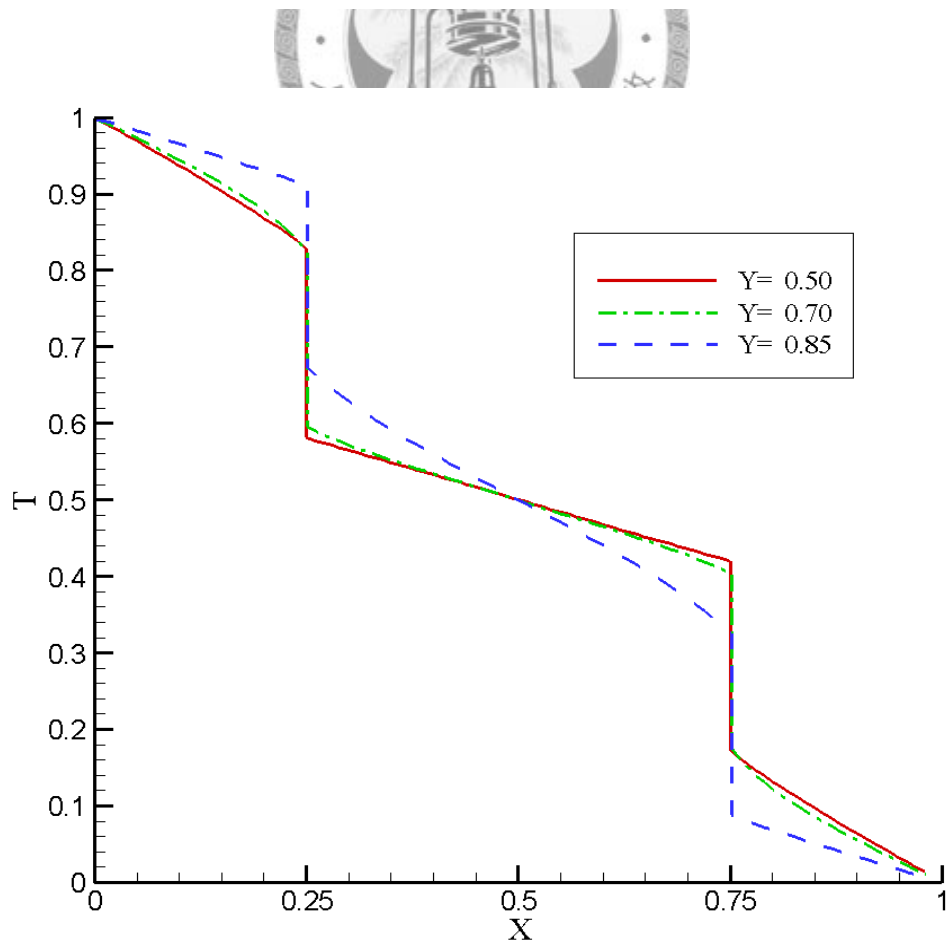
圖 4-19 鍺/矽緊密堆疊型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w = 10\text{nm}$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量

(a)



(b)



(c)

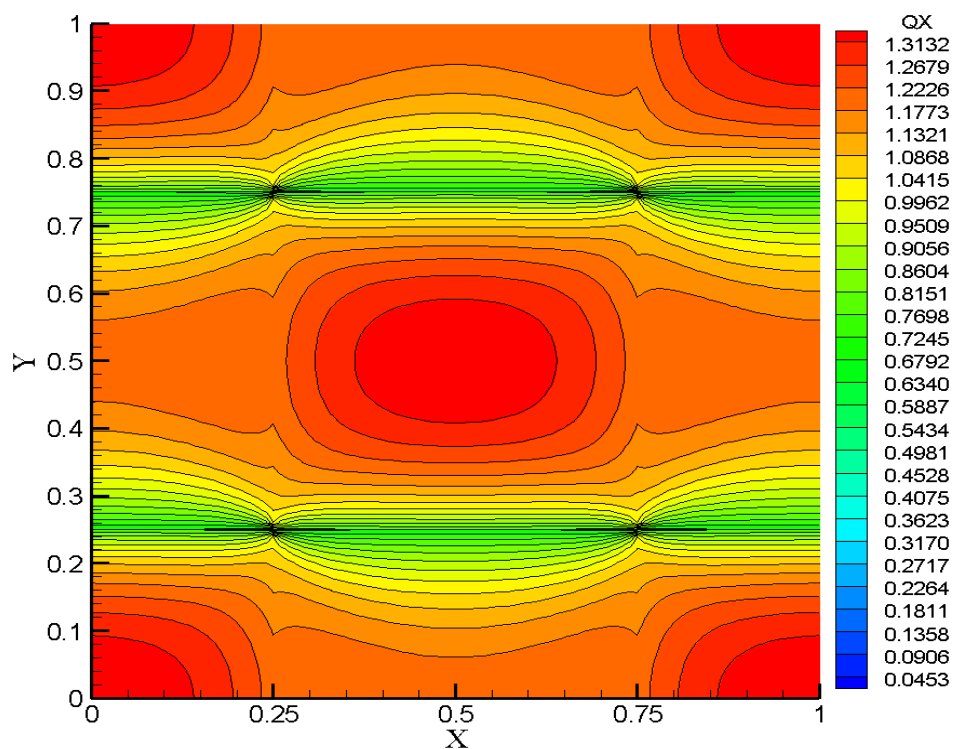
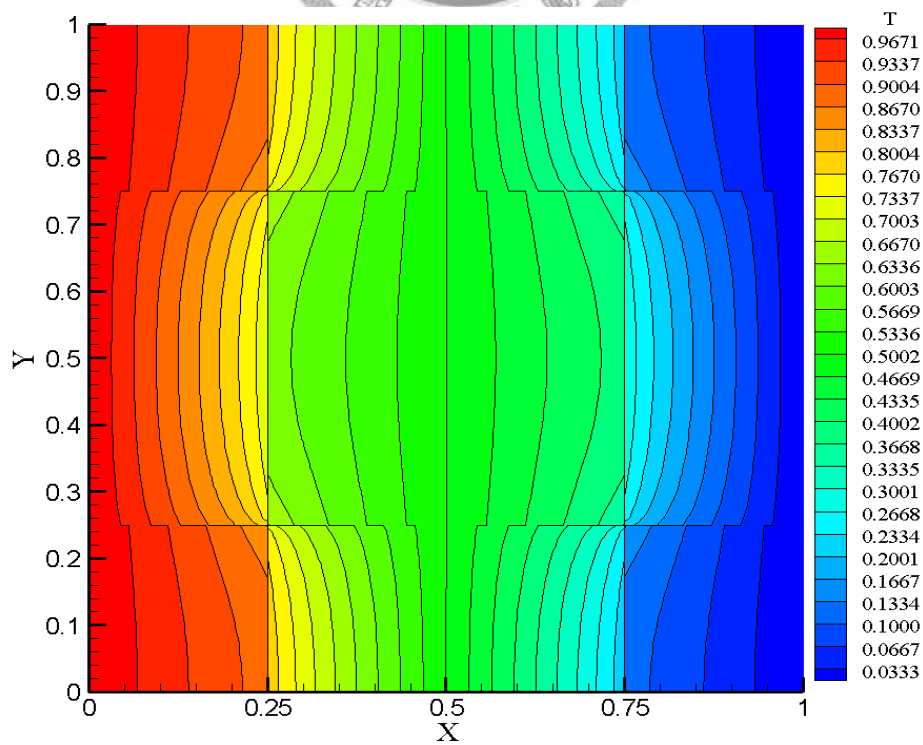


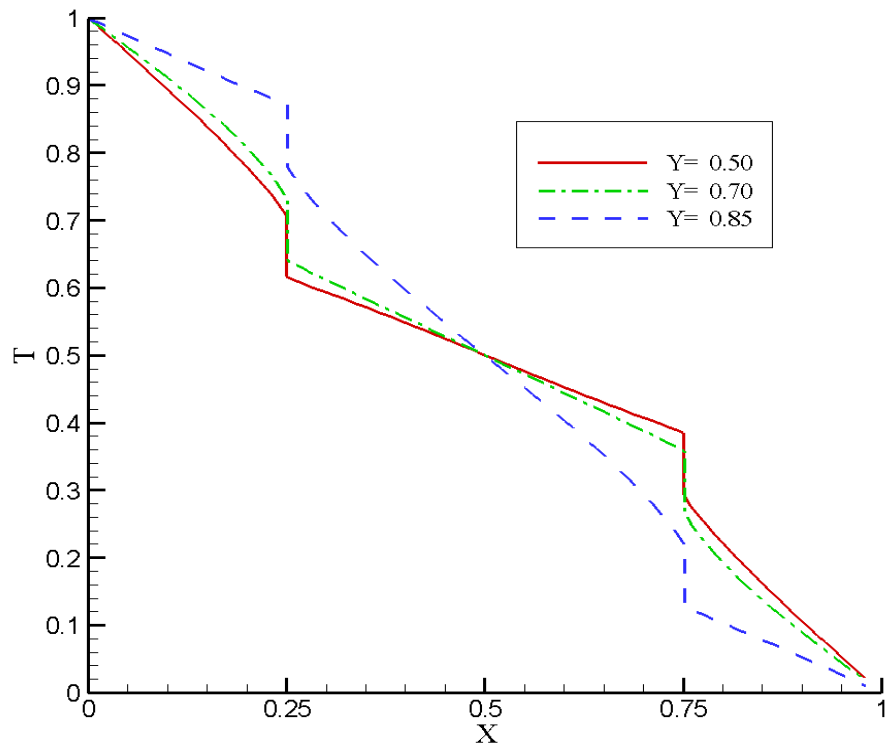
圖 4-20 鍺/矽緊密堆疊型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_w = 100\text{nm}$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量

(a)



(b)



(c)

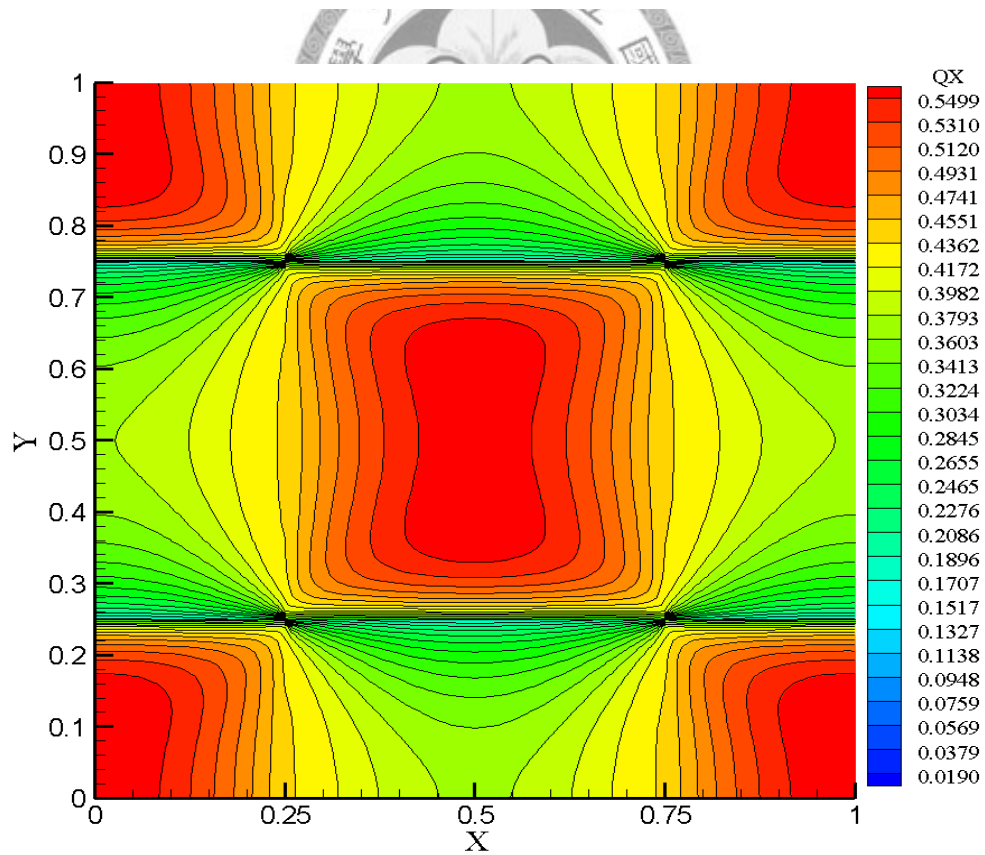


圖 4-21 鍺/矽緊密堆疊型超晶格 ($\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, $L_W = 1000\text{nm}$) 穩態結果：

(a) 溫度；(b) 溫度剖面圖；(c) x 方向熱通量

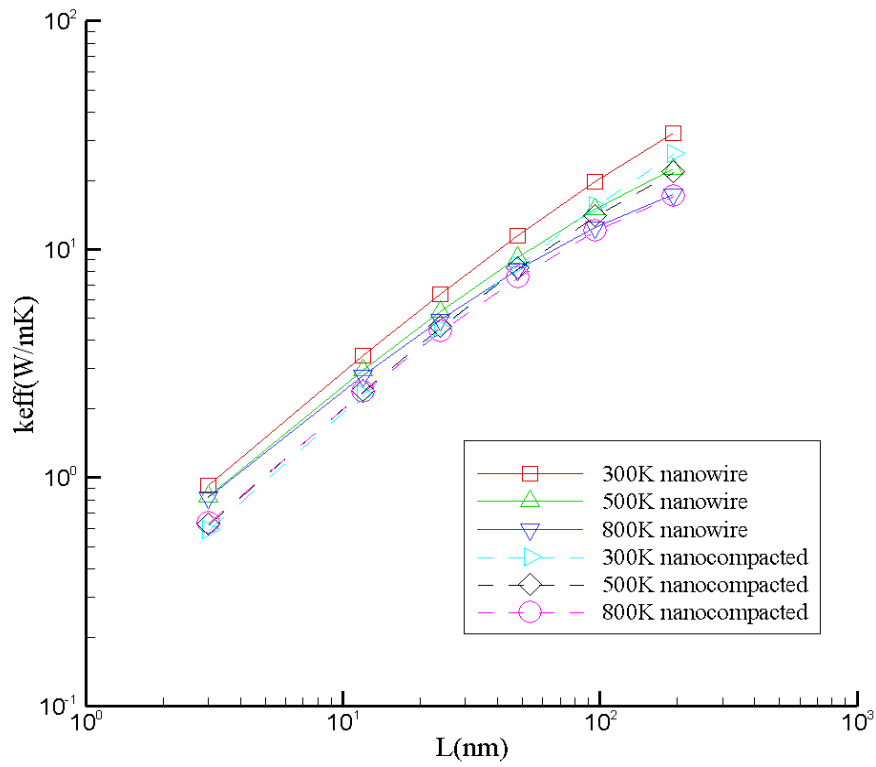


圖 4-22 鋅/矽線型與緊密型超晶格在 300K, 500K, 800K 熱傳導係數關係圖

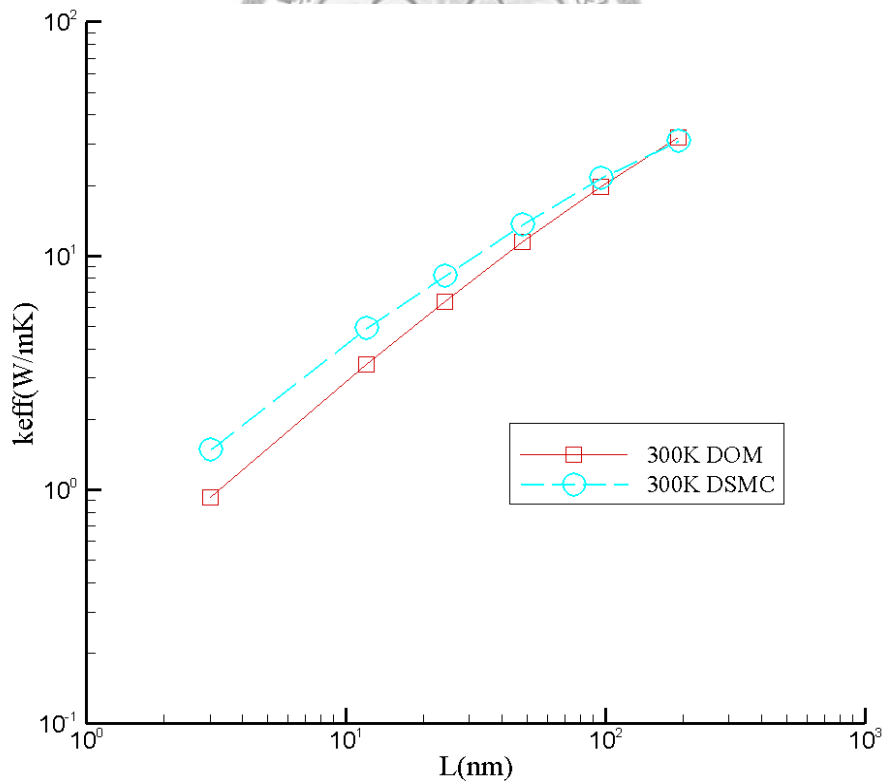


圖 4-23 鋅/矽線型在 300K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

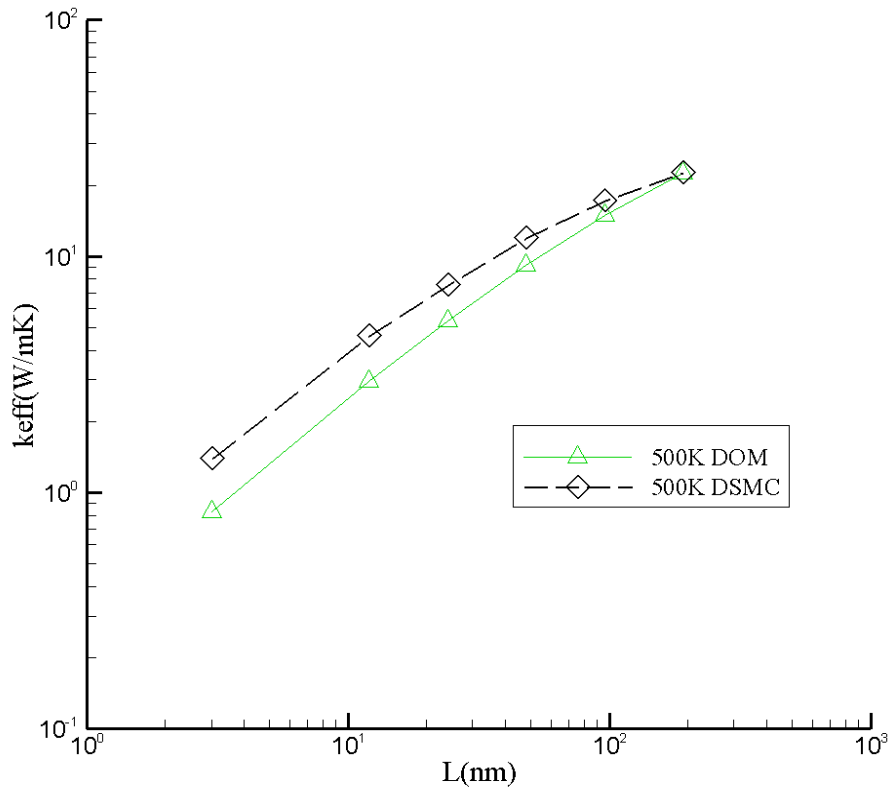


圖 4-24 鋅/矽線型在 500K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

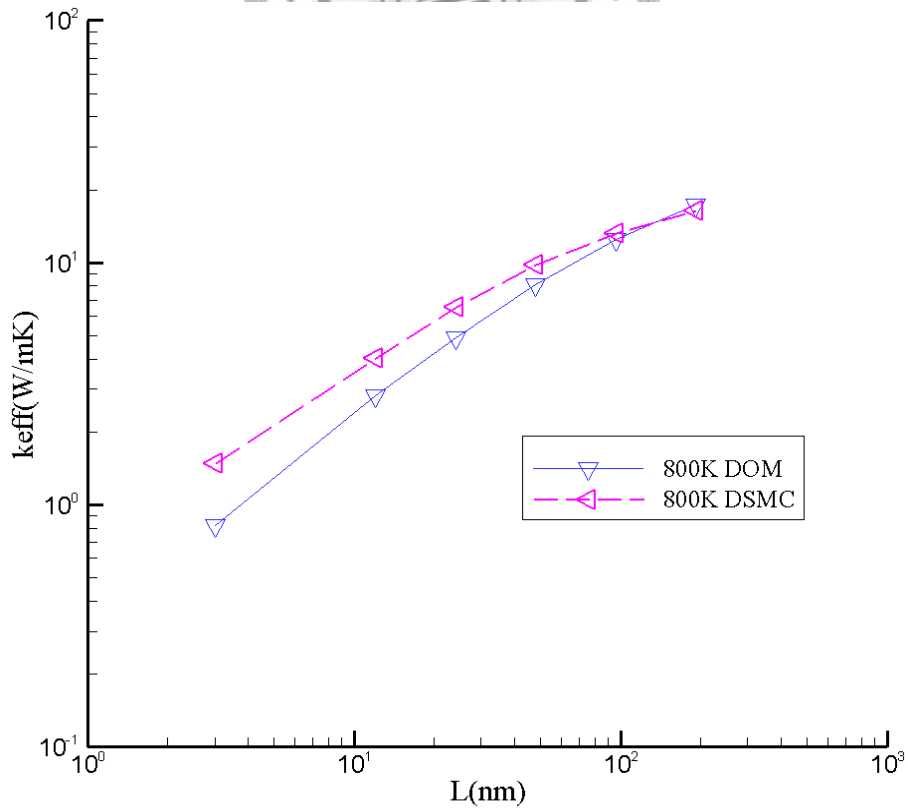


圖 4-25 鋅/矽線型在 800K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

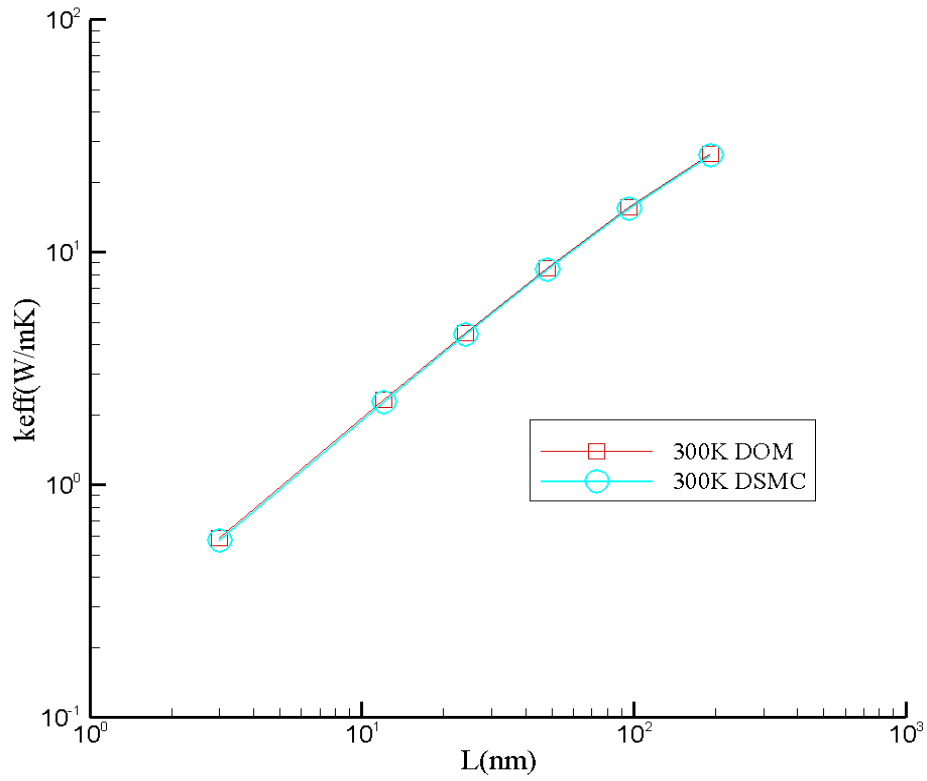


圖 4-26 鍺/矽緊密型在 300K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

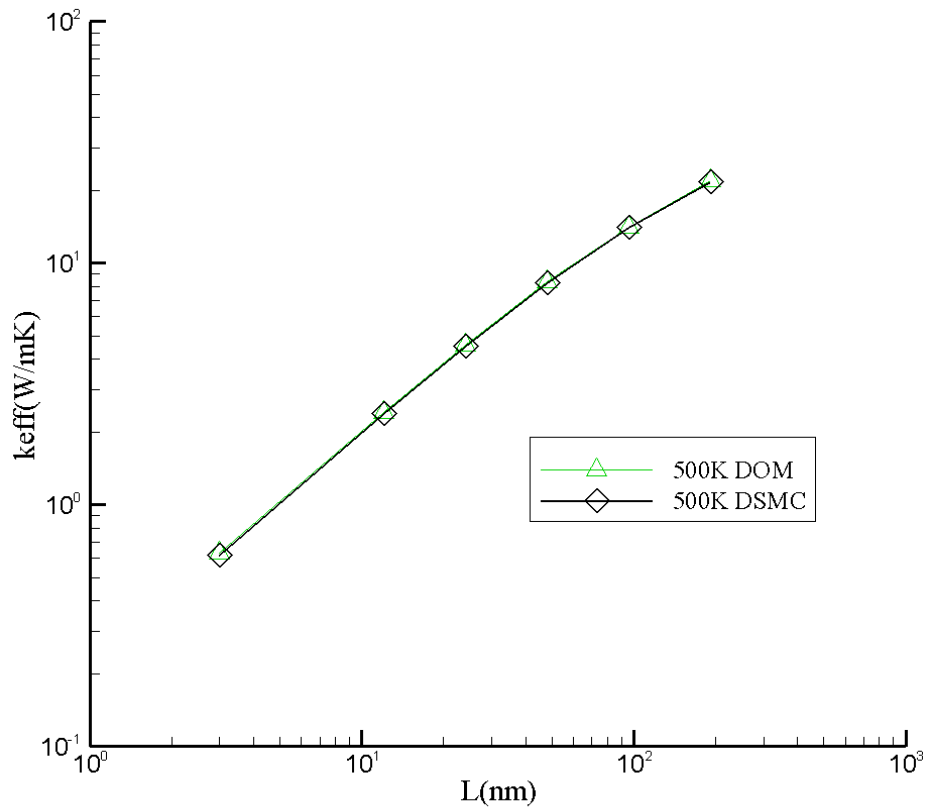


圖 4-27 鍺/矽緊密型在 500K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

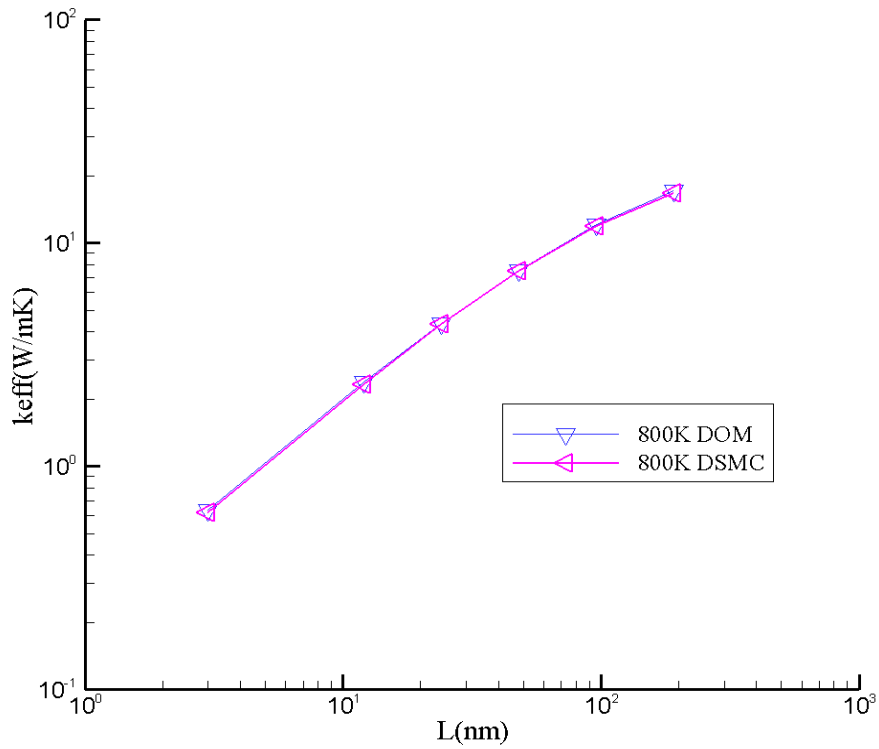


圖 4-28 鍺/矽緊密型在 800K DOM 與 DSMC 熱傳導係數比較圖

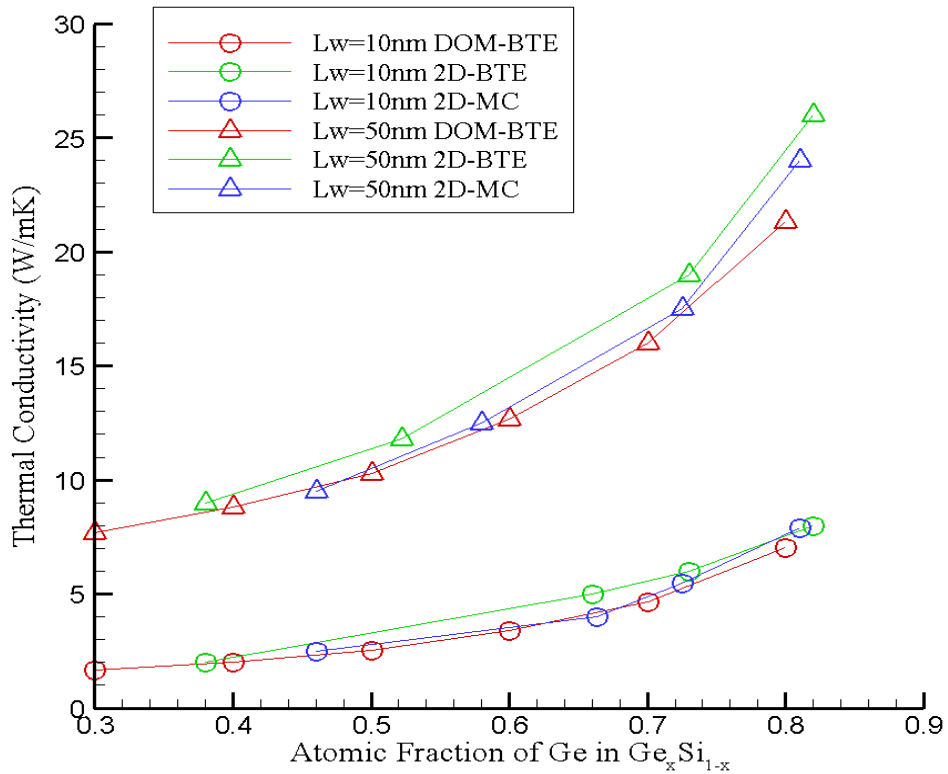


圖 4-29 鍺/矽線型在 Ge 所佔不同比例下之使用 BTE 及 MC 計算與本文計

算之熱傳導係數比較圖

第五章 結論與建議

本文模擬計算問題，首先從一維的薄膜超晶格出發，觀察一維的模型，調整中間所夾材料尺寸大小，可發現隨著材料尺寸的增加，界面對聲子熱傳的影響逐漸縮小，轉而變成材料內部的擴散影響增加，而當所夾材料尺寸越小，等於是在固定的基材長度中可以夾帶材料數越多，即表示界面數目越多，聲子傳遞要通過的界面數也越多，熱傳導率當然較低。在圖 4-7，試著固定矽材料，調整鍺材比例來觀察在不同尺寸大小下的熱傳導率變化。由於一維的問題在計算鍺所佔百分比時，除了 x 方向，其餘方向的材料長度皆為單位長度，故問題等於是計算鍺在 x 方向上單位晶胞長度所佔的比例。由模擬結果可看出在較微小的尺寸下，由於尺寸效應的作用，雖然鍺含量較少，但是熱傳導率卻是較低；反之，鍺含量較高，熱傳導率卻是較高，與傳統 Fourier 定律所預估的結果有落差；不過在較大尺寸下，模擬熱傳導率就與傳統 Fourier 定律預估的結果相似。

在二維模擬方面，與一維問題相同，亦調整內部所嵌材料尺寸大小，及界面密度對聲子在材料中傳遞的現象做模擬探討；在線型模型方面，線材在 10nm 時，材料界面前後處有溫度比邊界溫度略高及略低的現象；然而在緊密型模型之模擬，由於材料皆為不連續的面，故沒有界面前後處溫度較高或較低的現象產生；而在更大的尺寸的線材方面，此種在界面前後溫度略高及略低的現象，不管在線型或是緊密型模型方面，皆不再那麼明顯。在圖 4-15，與一維問題相同，固定矽材料，調整鍺材比例來觀察在不同尺寸大小下的熱傳導率變化。二維線型的模擬在計算鍺所佔百分比時，由於 z 方向為單位長度，故問題等於是計算鍺在 x 方向及 y 方向在單位晶胞內所佔的面積比例。模擬結果也是在較微小的尺寸下，因為尺寸效應，雖然鍺含量較少，但熱傳導率卻是較低；反之，鍺含量較高，熱傳導率卻是較高，與傳統 Fourier 定律所預估的結果有落差；在較大尺寸下，則模擬熱傳導率就與傳統 Fourier 定律預估的結果相似。

接著再將計算模擬的結果與 Tian, W. & Yang, R. [29]的研究數據從 300K ~

800K 做比較，比較模擬的結果可看出，與 Tian, W. & Yang, R. [29]所做的數據仍然有段差距，尤其在線型複合材料方面，數據差異性蠻大的，由於本文所採取的界面穿透率算法是以 Chen,1998 [4]所提出的穿透率算法為主，與 Yang 等人所採用的 Dames,2004 [10]所提出的算法不同，且在界面條件的設定上，可能還有問題存在，才會導致結果數據相差甚多，雖然 BTE 的計算與 MC 本身就會有誤差存在，但相差超過 10%，當中應該還有問題尚未解決。

未來展望：

本文目前只採用一階隱式迎風算則作計算模擬，在準確度方面當然也會有點差，且在線型的模擬方面，格點測試收斂性還是欠佳仍需要再修改，在未來後續之研究能夠繼續修改程式的完整度且能夠採用更高階的算則來計算，以提高精準度。

由於 Yang 等人已經有利用直接蒙地卡羅(DSMC)模擬出三維的現象，在本文研究中，由於未使用平行運算，且三維的計算量過於龐大，必須仰賴平行運算才能夠計算得出結果，期待未來後續的研究能夠將往三維的方向進行，能夠將問題從一維探討到三維結果，將這一系列的問題做更完善的探討。

參考文獻

- [1] **Bai, C. & Lavine, A. S., (1993)** “Thermal Boundary Conditions of Hyperbolic Heat Conduction”, ASME Heat Transfer Division, **253**, pp. 37-44.
- [2] **Capinski, W. S. & Maris, H. J., (1996)** “Thermal conductivity of GaAs/AlAs superlattices”, Physica B, **219**, pp. 699-701.
- [3] **Chen, G., (1997)** “Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures”, ASME Journal of Heat Transfer, **119**, pp. 220-229.
- [4] **Chen, G., (1998)** “Thermal Conductivity and Ballistic-Phonon Transport in the Cross-Plane Direction of Superlattices”, Physical Review B, **57**, pp. 14958-14973.
- [5] **Chen, G., (2000)** “Phonon Heat Conduction in Nanostructure”, International Journal of Thermal Sciences, **39**, pp. 471-480.
- [6] **Chen, G., (2001)** “Ballistic-Diffusive Heat-Conduction Equation”, Physical Review Letters, **86**, pp. 2297-2300.
- [7] **Chen, G., (2005)** *Nanoscale Energy Transport and Conversion*, Oxford University Press.
- [8] **Chen, G., Tien, C. L., Wu, X. & Smith, J. S., (1994)** “Thermal Diffusivity Measurement of GaAs/AlGaAs Thin-Film Structures”, ASME Journal of Heat Transfer, **116**, pp. 325-331.
- [9] **Chen, G. & Neagu, M., (2001)** “Thermal Conductivity and Heat Transfer in Superlattices”, Applied Physics Letters, **71**, pp. 2761-2763.
- [10] **Dames, C. & Chen, G., (2004)** “Theoretical Phonon Thermal Conductivity of Si/Ge Superlattice Nanowire”, Journal of Applied Physics, **95**, pp. 682-692.

- [11] **Flik, M. I., (1990)** “Size Effect on Thermal Conductivity of High-Tc Thin-Film Superconductors”, ASME Journal of Heat Transfer, **112**, pp. 872-880.
- [12] **Hyldgaard, P. & Mahan, G. D., (1997)** “Phonon superlattice transport”, Physical Review B, **56**, pp. 10754-10757.
- [13] **Jeng, Ming-Shan, Yang, R., Song, D. & Chen,G., (2008)**“Modeling the Thermal Conductivity and Phonon Transport in Nanoparticle Composites Using Monte Carlo Simulation1”, Journal of Heat Transfer, **130** , pp. 042410-1
- [14] **Joshi, A. A. & Majumdar, A., (1993)** “Transient Ballistic and Diffusive Phonon Heat Transport in Thin Films”, Journal of Applied Physics, **74**, pp. 31-38.
- [15] **Kittel, C., (1986)** *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York.
- [16] **Little, W. A., (1959)** “The Transport of Heat Between Dissimilar Solids at Low Temperature”, Canadian Journal of Physics, **37**, pp. 334-349.
- [17] **Majumdar, A., (1993)** “Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Film”, ASME Journal of Heat Transfer, **115**, pp. 7-16.
- [18] **Modest, M. F., (1993)** *Radiative Heat Transfer*, McGraw-Hill, Inc.
- [19] **Murthy, J. Y. & Mathur, S. R., (2002)** “Computation of Sub-Micro Thermal Transport Using an Unstructured Finite Volume Method”, ASME Journal of Heat Transfer, **124**, pp. 1176-1181..
- [20] **Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. & Amon, C. H., (2004)** “Submicron Heat Transport Model in Silicon Accounting for Phonon Dispersion and Polarization”, ASME Journal of Heat Transfer, **126**, pp. 946-955.

- [21] **Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. & Amon, C. H., (2006)** “Boltzmann Transport Equation-Based Thermal modeling Approach for Hotspots in Microelectronics”, *Heat Mass Transfer*, **42**, pp. 478-491.
- [22] **Phelan, P. E., (1998)** “Application of Diffuse Mismatch Theory to the Prediction of Thermal Boundary Resistance in Thin-Film High-Tc Superconductors”, *ASME Journal of Heat Transfer*, **120**, pp. 37-43.
- [23] **Prasher, R. S. & Phelan, P. E., (2001)** “A Scattering-Mediated Acoustic Mismatch Model for the Prediction of Thermal Boundary Resistance”, *ASME Journal of Heat Transfer*, **123**, pp. 105-112.
- [24] **Siegel, R. & Howell, J. R., (1982)** *Thermal Radiation Heat Transfer*, 2nd edition, Hemisphere, New York.
- [25] **Simkin, M. V. & Mahan, G. D., (2000)** “Minimum Thermal Conductivity of Superlattices”, *Physical Review Letters*, **84**, pp. 927-930.
- [26] **Srinivasan, S., Miller, R. S. & Marotta, E., (2004)** “Parallel Computation of the Boltzmann Transport Equation for Microscale Heat Transfer in Multilayered Thin Films”, *Numerical Heat Transfer, Part B*, **46**, pp. 31-58.
- [27] **Swartz, E. T., (1987)** “Solid-Solid Thermal Boundary Resistance” Ph.D. thesis, Cornell University.
- [28] **Swartz, E. T. & Pohl, R. O., (1989)** “Thermal Boundary Resistance”, *Reviews of Modern Physics*, **61**, pp. 605-668.
- [29] **Tian, W. & Yang, R., (2007)** “Thermal Conductivity Modeling of Compacted Nanowire Composites”, *Journal of Applied Physics*, **101**, pp. 054320.
- [30] **Tian, W. & Yang, R., (2007)** “Effect of interface scattering on phonon thermal conductivity percolation in random nanowire composites”, *Applied Physics Letters*, **90**, pp.263105.

- [31] **Tien, C. L., Armaly, B. F. & Jagannathan, P. S., (1969)** “Thermal Conductivity of Metallic Films and Wires at Cryogenic Temperature”, Proc. 8th Thermal Conductivity Conference, New York, pp.13-19
- [32] **Yang, R. & Chen, G., (2004)** “Thermal Conductivity Modeling of Periodic Two-Dimensional Nanocomposites”, Physical Review B, **69**, pp. 195316.
- [33] **Yang, R., Chen, G. & Dresselhaus, M. S., (2004)** “Thermal Conductivity of Simple and Tubular Nanowire Composites in the longitudinal Direction”, Physical Review B, **72**, pp.125418.
- [34] **Yang, R., Chen, G., Laroche, M. & Taur, Y., (2005)** “Simulation of Nanoscale Multidimensional Transient Heat Conduction Problems Using Ballistic-Diffusive Equations and Phonon Boltzmann Equation”, ASME Journal of Heat Transfer, **127**, pp. 298-306.
- [35] **Zeng, T. & Chen, G., (2001)** “Phonon Heat Conduction in thin Film: Impacts of Thermal Boundary Resistance and Internal Heat Generation”, ASME Journal of Heat Transfer, **123**, pp. 340-347.
- [36] 劉靜，微米 / 奈米尺度熱傳學，北京，科學出版社，2001
- [37] 謝澤揚，聲子熱傳輸與理想量子氣體動力學之高解析算則，國立臺灣大學工學院應用力學所博士論文，台北，2007
- [38] 林義傑，應用高解析算則及修正分離座標法之微觀薄膜熱傳分析，國立臺灣大學工學院應用力學所碩士論文，台北，2007