

УДК 519.63-37-73:535+537.8

## ТЕПЛООБМЕН В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МЕТАМАТЕРИАЛАХ

**С. А. Филатов, М.Н. Долгих, О.С. Филатова, Е.В.  
Батырев,  
Е.В. Макаров, Н.А. Гавриленко**

*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН  
Беларуси, г. Минск, Беларусь*

Современные нанотехнологии предполагают манипулирование веществом в атомном, молекулярном и супрамолекулярном масштабе, при котором хотя бы одно измерение находится в диапазоне от 1 до 100 нм. Современные исследования [1-6] показали, что в таких наноструктурированных средах ряд физических свойств - механических, электрических, оптических и теплофизических изменяется по сравнению с макроскопическими системами и квантово-механические эффекты существенно определяют свойства вещества в этом масштабе. В случае, когда свойства вещества определяются спроектированной и искусственно созданной периодической структурой, а не свойствами составляющих вещество элементов, можно говорить о создании метаматериалов с особыми свойствами []. В частности, двумерные метаматериалы (метаповерхности), имеют уникальные свойства пропускания и отражения поверхности раздела, обусловленные, преимущественно, поверхностным электромагнитным импедансом. Последние достижения в области метаматериалов и метаповерхностей открывают новые возможности для создания инженерных материалов с управляемыми свойствами, которые не проявляются

природными материалами. Однако создание таких материалов требует новых подходов к решению задач теплообмена, чтобы наиболее полно реализовать их потенциал в практических применениях, связанных с созданием микроэлектронных устройств.

Современные классические наноструктурированные системы характеризуются пространственными масштабами сопоставимыми с длинами свободного пробега электронов и фононов (~5–10 нм для электронов и 200–300 нм для фононов), для которых характерны баллистические, а не диффузионные механизмы переноса и существенная неравновесность распределения фононов и электронов, приводящая к росту вклада оптических фононов в передачу энергии в дополнении к акустическим фононам. Это также приводит к тому, что теплопроводность полупроводниковых слоев с толщиной сравнимой с длинами свободного пробега фононов значительно уменьшается вследствие удержания фононов и граничного рассеяния, особенно в многослойных полупроводниковых и диэлектрических структурах. В современной практике фононная составляющая определяет величину теплообмена в многослойных наноразмерных структурах полупроводниковых лазеров, что во многом ограничивает их мощность. Фононная теплопроводность также доминирует в современных теплозащитных материалах, выполненных на основе многослойных диэлектрических плёнок. Следует отметить, что наряду с объемными свойствами слоев, на теплофизические свойства периодических структур влияют свойства межслойных границ. Создание метаматериалов на основе периодических двумерных и трехмерных наноструктур позволяет значительно расширить возможности в создании

материалов для теплового интерфейса и новых теплообменных структур.

Классическая теплофизика базируется, основана на фундаментальных законах сохранения массы, импульса и энергии, на законах термодинамики, молекулярно-кинетической теории и уравнений макроскопического описания физических процессов [1–6]. Среди понятий носителей энергии и импульса основное место в классической теплофизике занимают свободные носители — атомы и молекулы, электроны и ионы, а также коллективные степени свободы, в том числе коллективные колебания кристаллической решетки (фононы), электроны в конденсированных телах (квазичастицы с определенным законом дисперсии), магноны (коллективные возбуждения спинов), поляритоны и поляроны — квазичастицы, возникающие за счет связей квазичастиц с электромагнитным полем в конденсированных телах. Эти носители обладают различными степенями свободы — поступательными, вращательными, колебательными или иными внутренними. Помимо этого, носители энергии имеют классическую природу (точечные частицы) или волновую (квантовую). Состояние таких носителей характеризуется набором классических величин (координата и импульс) или задается волновой функцией и дополнительными квантовыми числами. Динамика носителей в первом случае описывается ньютоновской механикой, а во втором — квантовой механикой, что определяет различные уравнения эволюции состояний — уравнения Ньютона (классические носители) или квантовое уравнение эволюции (уравнение Шрёдингера). Кроме перечисленных носителей в отдельных случаях появляются дополнительные квазичастицы или гибридные состояния перечисленных носителей — магноны,

связанные с движением спина, или плазмоны и фонон-поляритоны, связанные со сложными состояниями стандартных носителей и электромагнитного поля. Ансамбли носителей подчиняются в статистическом смысле различным функциям равновесного распределения — Максвелла–Больцмана, Бозе–Эйнштейна (или Планка) и Ферми– Дирака.

Для моделирования процессов распространения энергии и теплообмена в метаматериалах со сложной геометрией может быть эффективно использовано программное обеспечение Lumerical FDTD Solutions позволяющее решить уравнения Максвелла методом конечных разностей во временной области (FDTD) , что позволяет эффективно решить проблемы разработки, анализа и оптимизации инженерных метаматериалов для применения в оптической области, СВЧ и терагерцовом диапазоне. В методе FDTD пространству модели сопоставляется сетка регулярно расположенных узлов, в каждом из которых задаётся значение одной из компонент электрического или магнитного поля, а частная производная в уравнениях Максвелла заменяется отношением разности между значениями компонент поля в близко расположенных узлах к расстоянию между этими узлами (в пространстве и времени). Метод FDTD реализует численно алгоритм Йи дискретизации уравнений Максвелла, записанных в дифференциальной форме, в котором пространственные сетки для электрического и магнитного полей смещены по отношению друг к другу на половину шага дискретизации по каждой из пространственных переменных и по времени, рисунок 1 В этом случае конечно-разностные уравнения определяют электрические и магнитные поля на данном временном шаге на основании известных значений полей на предыдущем, и при заданных начальных условиях

вычислительная процедура дает эволюционное решение во времени от начала отсчета с заданным временным шагом.

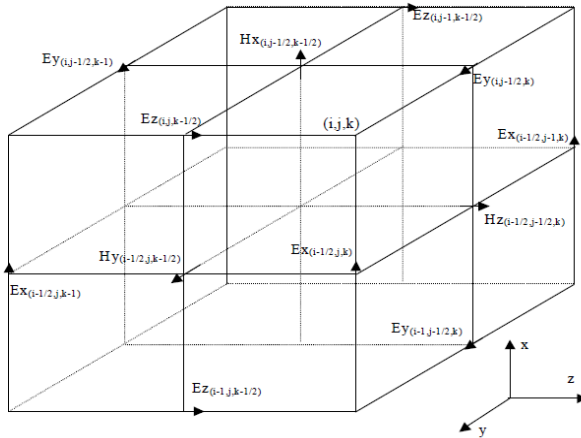
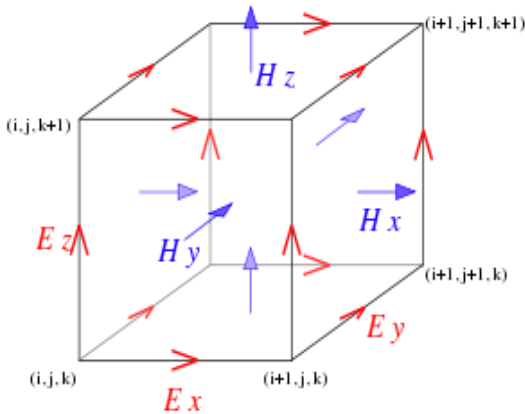


Рисунок 1. Элементарная ячейка расчетной сетки в алгоритме Йи (FDTD).

Шаг сетки дискретизации определяется из условия устойчивости явного численного решения по критерию Куранта—Фридрихса—Леви и в большинстве практических случаев шаг дискретизации по пространству должен быть меньше, чем  $\lambda/40$ , а плотность дискретизации

по времени до 100 шагов на период колебаний, что во многом определяет вычислительную сложность модели и требования к вычислительной системе [7], рисунок 2,3.

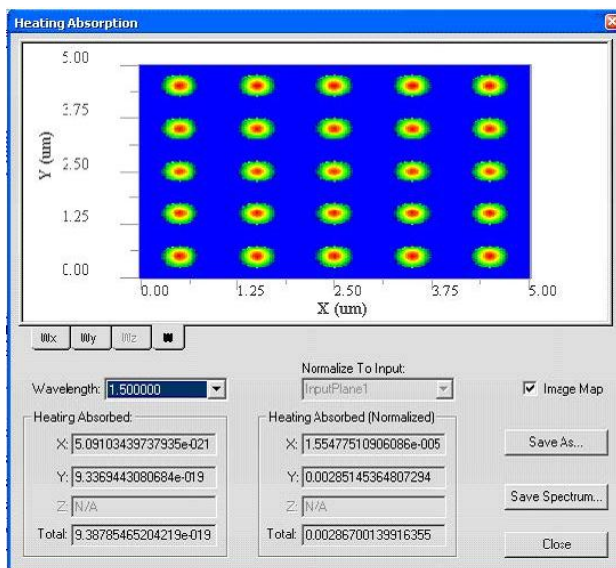
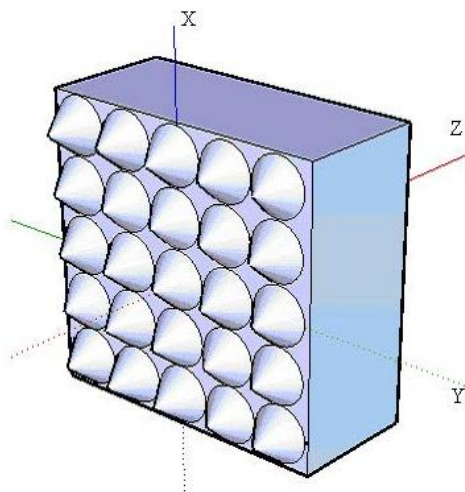


Рисунок 2. Рабочее окно программы Optiwave при расчете теплообмена в наноструктурированной двумерной метаповерхности (диэлектрическая двумерная решетка из конусов высотой 1000 нм)

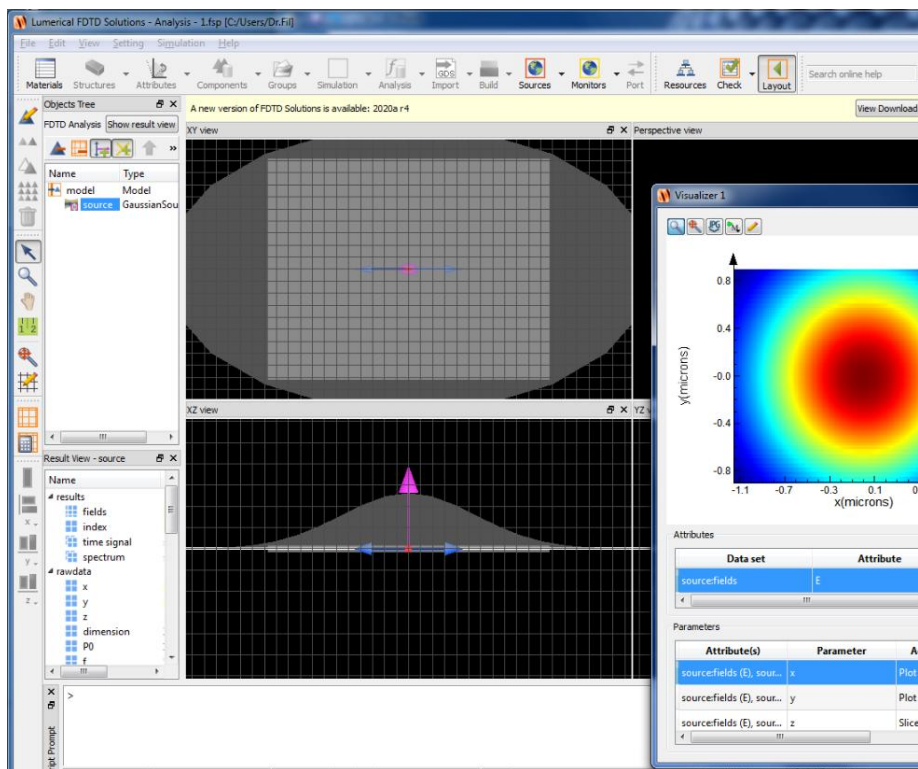


Рисунок 3. Рабочее окно программы Lumerical FDTD при расчете плотности электромагнитного излучения в наноструктурированных средах.

Для создания метаматериалов по цифровой модели традиционно используются системы электронной и

оптической литографии. Как показали проведенные эксперименты, для создания метаматериалов оптического и терагерцового диапазона, наряду с традиционными методами безмасочной стереолитографии могут быть использованы проекционные фотополимерные 3D принтеры. Современные технические решения позволяют создавать как одномерные метаматериалы, в которых свойства изменяются лишь в одном направлении (как правило – параллельные слои элементов, в которых специфические свойства проявляются лишь в направлении перпендикулярном слоям), так и двухмерные метаматериалы (как правило периодические структуры расположенные в виде трехмерной матрицы) и трехмерные метаматериалы, рисунок 4-5..

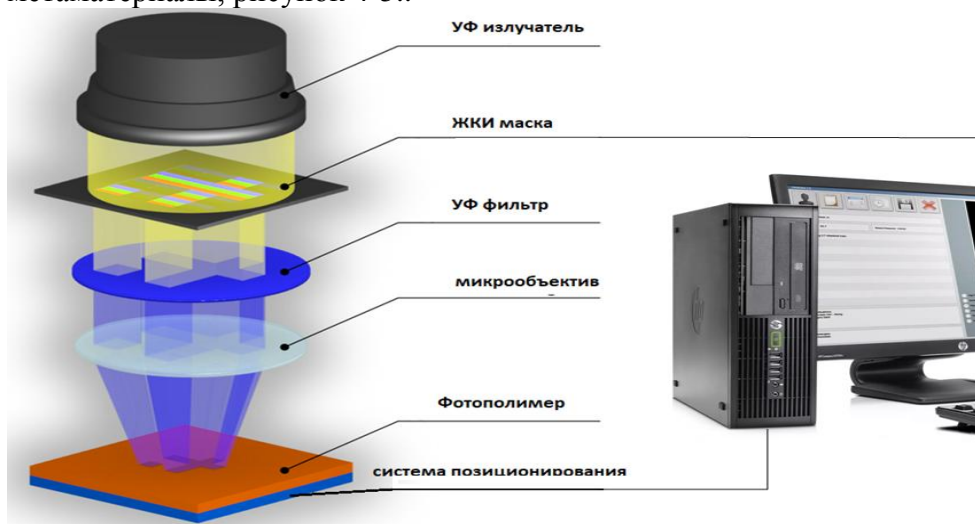


Рисунок 4. Структура классической 2D системы безмасочной некогерентной стереолитографии



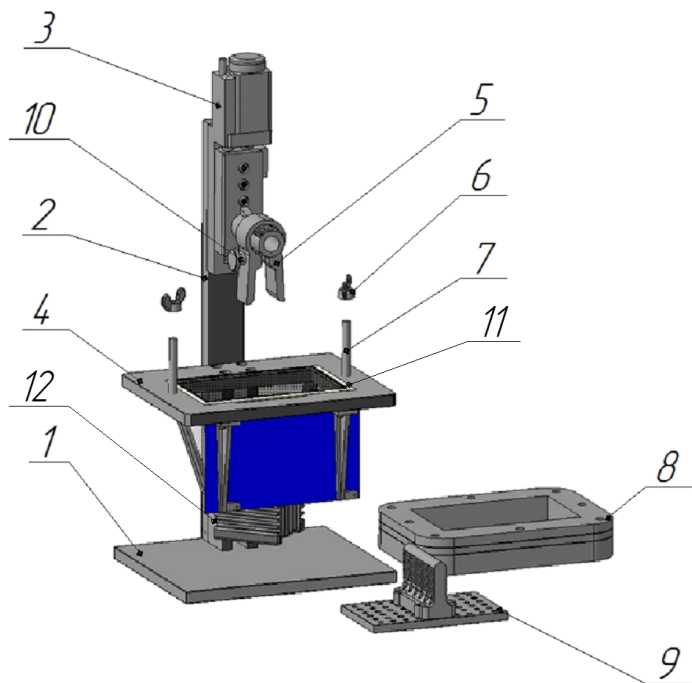




Рисунок 5. Макетный образец экспериментальной системы безмасочной стереолитографии: 1 - основание; 2 - стойка; 3 - моторизованный линейный транслятор; 4 - платформа; 5 - зажим; 6 - гайки-крепёжные; 7 - направляющие винты; 8 - кювета; 9 - подложка; 10 - зажимной винт; 11 -ЖКИ; 12 - радиатор с установленными светодиодами и прототип металниз терагерцового диапазона.

Особенностью реализованного метода формирования метаматериалов с наноразмерными проводящими наполнителями, является послойное формирование трехмерных объектов из отверждаемой ультрафиолетовым излучением фотополимерной смолы для создания твердых трехмерных объектов с заданной геометрией послойно по цифровой модели. Введение в фотополимер оптически

активных наноразмерных частиц обеспечивает возможность реализации ап-конверсии излучения и возможность создания оптических нелинейных сред. В перспективе предполагается использование когерентного оптического излучения для создания периодических микро-и наноразмерных структур в образце и возможности управления оптическими и теплофизическими свойствами наноструктурированных метаматериалов и метаповерхностей.

Проведенные исследования подтвердили возможность моделирования процессов распространения электромагнитного излучения в пространственно неоднородных средах и наноструктурированных композиционных материалов для создания цифровых моделей анизотропных композиционных материалов – метаматериалов и метаповерхностей, которые могут быть использованы в перспективных разработках теплообменных систем микроэлектронной техники и в системах регистрации и обработки оптических сигналов, СВЧ и терагерцового излучения. Представляется также перспективным разработка метаматериалов с анизотропной теплопроводностью для управления тепловыми потоками в ультратонких композитах, к которым относятся, например, многослойные печатные платы. Спроектированные на основе компьютерных моделей метаматериалы могут обеспечить качественно новые тепловые характеристики объектов, которые не могут быть достигнуты при использовании однородных гомогенных материалов.

## **Литература**

1. Хвесюк В.И., Скрябин А.С. Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур, 2017, том 55, № 3. - С. 447–471.

2. Введение в нанотеплофизику / А. С. Дмитриев. – М. : БИНОМ, 2015. – 790 с.
3. Тепловые процессы в наноструктурах / Дмитриев А.С. - М.: Изд. дом МЭИ, 2012. - 302 с. Fisher T.S. Thermal Energy at the Nanoscale. - Singapore: World Scientific, 2013. - 171 p.
4. Cahill D.G., Ford W.K., & Goodson K.E., Mahan G.D., Madjumar A., Maris H.J., Merlin R. Nanoscale Thermal Transport // J. Appl. Phys., 2003, V. 93. № 2. - P. 793-802.
5. Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями  $\epsilon$  и  $\mu$  // УФН. 1967. Т. 92. С. 517.
6. Манцызов Б.И. Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов. — М.: Физматлит, 2009. — 206 с.
7. Ладутенко К. С., Белов П. А. Моделирование интегральных схем нанофотоники: метод FDTD // Наносистемы: физика, химия, математика, 2012, 3 (5), с. 42–61