

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.

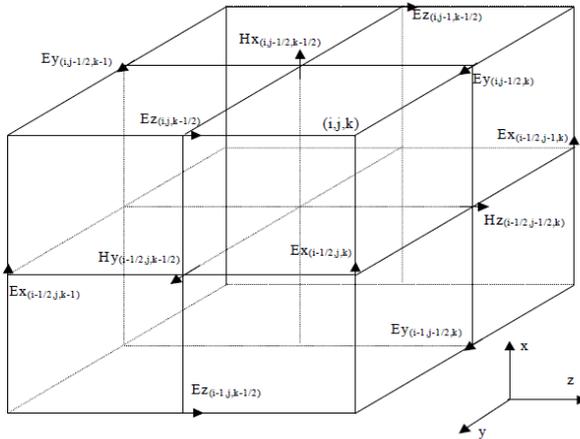
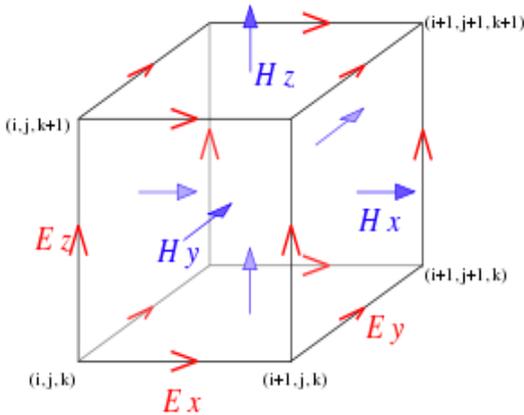


Рисунок 1. Элементарная ячейка расчетной сетки в алгоритме Йи (FDTD).

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.

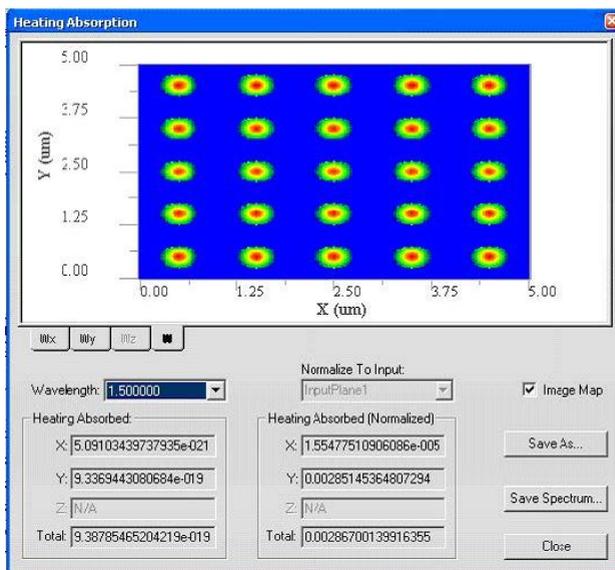
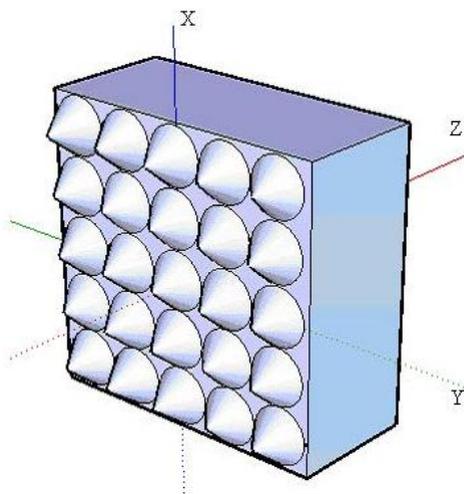


Рисунок 2. Рабочее окно программы Optiwave при расчете теплообмена в наноструктурированной двумерной метаповерхности (диэлектрическая двумерная решетка из конусов высотой 1000 нм)

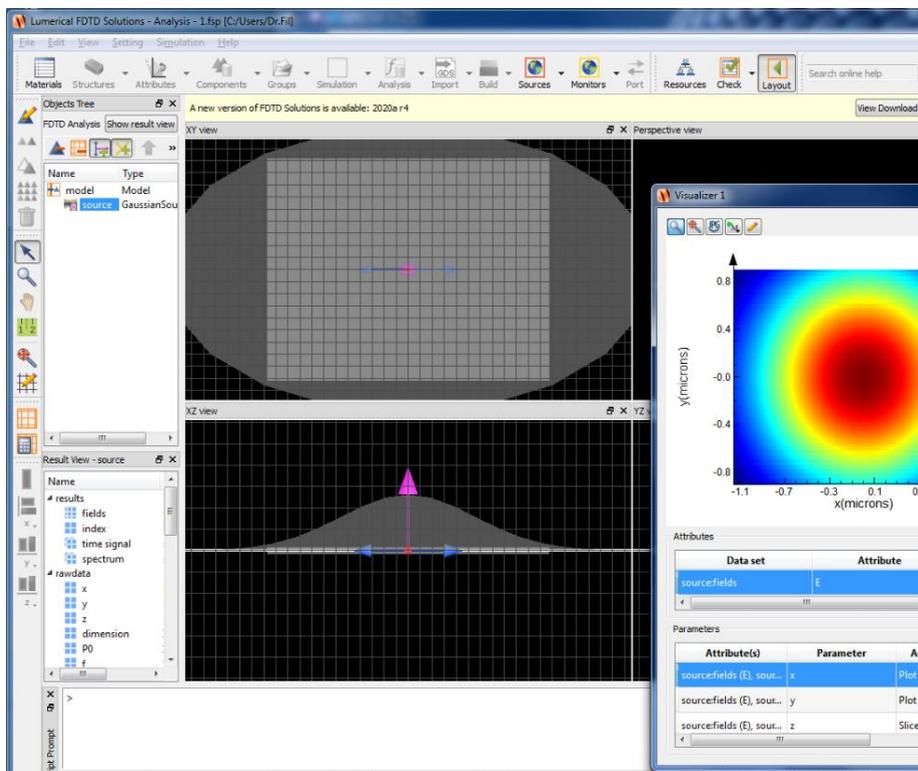


Рисунок 3. Рабочее окно программы Lumerical FDTD при расчете плотности электромагнитного излучения в наноструктурированных средах.

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..

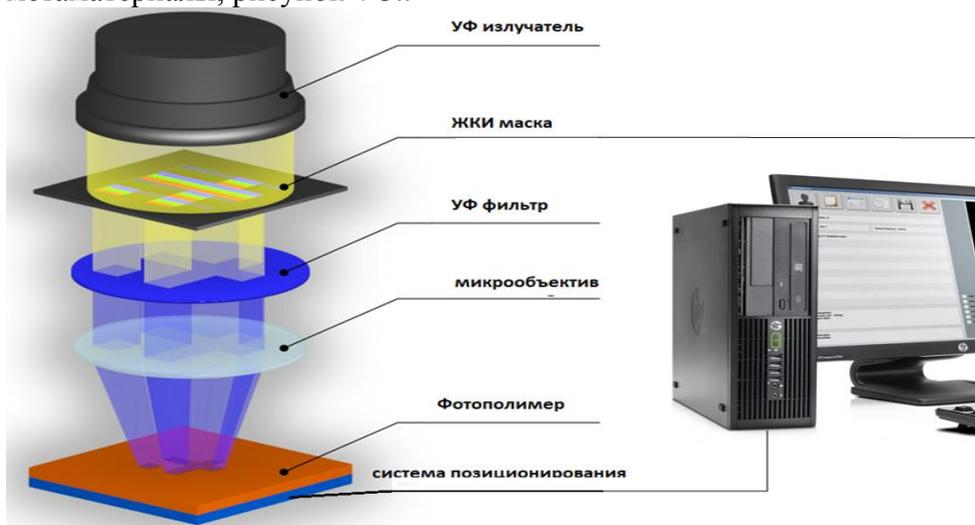


Рисунок 4. Структура классической 2D системы безмасочной некогерентной стереолитографии



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., Скрыбин 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 ϵ и μ // 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