

● ● ● НАНОТЕХНОЛОГИИ ● ● ●

Научная библиотека

БНТУ



\* 8 0 1 2 7 1 3 2 5 \*

А. С. Дмитриев

# ВВЕДЕНИЕ В НАНОТЕПЛОФИЗИКУ



Москва  
БИНОМ. Лаборатория знаний

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

<b>Введение . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>Глава 1. Классическая теплофизика . . . . .</b>	<b>15</b>
1.1. Объекты и методы классической теплофизики. Носители энергии и их основные свойства . . . . .	15
1.2. Классическая термодинамика и статистика . . . . .	17
1.2.1. Законы термодинамики . . . . .	17
1.2.2. Статистические функции распределения . . . . .	17
1.2.3. Вычисление термодинамических функций . . . . .	20
1.3. Перенос тепла в классической теплофизике . . . . .	30
1.3.1. Средняя длина свободного пробега в межмолекулярных взаимодействиях в газах и теплопроводность . . . . .	30
1.3.2. Перенос тепла в твердых диэлектриках. Фононная теплопроводность . . . . .	32
1.3.3. Перенос тепла в металлах . . . . .	35
1.3.4. Явления переноса: уравнение Больцмана . . . . .	35
1.3.5. Уравнение Больцмана и макроскопические переменные . . . . .	37
1.3.6. Теплопроводность: уравнение Фурье, уравнение Каттанео и их обобщение . . . . .	38
1.4. Уравнения гидродинамики вязкой жидкости . . . . .	42
1.5. Уравнения конвективного переноса тепла . . . . .	43
1.6. Размерные эффекты в классической термогидродинамике . . . . .	46
1.6.1. Теплопроводность в газе с учетом размерных эффектов . . . . .	46
1.6.2. Поток тепла в баллистическом режиме . . . . .	47
1.6.3. Переходы между режимами . . . . .	49
1.7. Радиационный перенос тепла . . . . .	51
1.7.1. Феноменологическое описание радиационного переноса тепла . . . . .	52
1.7.2. Рассеяние в диффузионной среде . . . . .	54
1.7.3. Электромагнитное происхождение теплового излучения . . . . .	57
1.8. Основные ограничения классической теплофизики и новые подходы . . . . .	57
<b>Глава 2. Наномир и объекты нанотеплофизики . . . . .</b>	<b>59</b>
2.1. Мир наномасштаба . . . . .	59
2.2. Объекты нанотеплофизики: наноструктуры и процессы в них . . . . .	60
2.2.1. Объекты нанотеплофизики . . . . .	60
2.3. Особенности теплофизики наномира . . . . .	67
2.3.1. Масштабные факторы в теплофизике . . . . .	71
2.3.2. Классические и квантовые размерные эффекты . . . . .	71
2.3.3. Роль объема и поверхности в процессах переноса тепла . . . . .	76

2.4. Экспериментальные методы изготовления наноструктур . . . . .	76
2.5. Методы экспериментального исследования термодинамических и кинетических явлений в наноструктурах. . . . .	81
2.5.1. Сканирующая тепловая микроскопия. . . . .	81
2.5.2. ЗФ-техника . . . . .	85
2.5.3. Техника термического коэффициента отражения . . . . .	88
2.5.4. 2Ф-метод измерения тепловых свойств на наномасштабах. . . . .	88
<b>Глава 3. Термодинамика наноструктур . . . . .</b>	90
3.1. Носители энергии в конденсированных телах и газах . . . . .	90
3.2. Термодинамика наноструктур . . . . .	90
3.2.1. Понятие температуры . . . . .	91
3.2.2. Примеры важности определения температуры. . . . .	93
3.2.3. Понятие термодинамического среднего. . . . .	93
3.3. Внутренняя энергия и удельная теплоемкость наноструктур . . . . .	94
3.3.1. Теплоемкость наночастиц . . . . .	94
3.3.2. Теплоемкость нанопроволок . . . . .	99
3.4. Теплоемкость нанотрубок. . . . .	106
3.5. Удельная теплоемкость 2D-графена и 3D-графита . . . . .	108
3.6. Удельная теплоемкость одностенных пучков нанотрубок и многостенных нанотрубок . . . . .	111
3.7. Неуглеродные нанотрубки . . . . .	113
<b>Глава 4. Кинетика переноса тепла в наноструктурах. . . . .</b>	115
4.1. Особенности кинетики переноса тепла в наноструктурах. . . . .	115
4.1.1. Механизмы переноса тепла — наномасштабные факторы . . . . .	116
4.1.2. Некоторые характерные масштабы и режимы переноса тепла . . . . .	119
4.1.3. Пределы теплопереноса в наноструктурированных материалах. . . . .	125
4.1.4. Явления наномасштабного переноса тепла. . . . .	131
4.2. Общие методы кинетики переноса тепла в различных приближениях . . . . .	135
4.3. Формализм Ландауэра. . . . .	138
4.4. Уравнение Больцмана . . . . .	142
4.4.1. Введение . . . . .	142
4.4.2. Приближение времени релаксации . . . . .	145
4.4.3. «Серое» приближение для фононного уравнения Больцмана . . . . .	147
4.4.4. «Полусерое» приближение для фононного уравнения Больцмана . . . . .	150
4.4.5. Полностью дисперсионное приближение для фононного уравнения Больцмана . . . . .	151
4.4.6. Баллистически-диффузионное уравнение . . . . .	153
4.4.7. Методы Монте-Карло для уравнения Больцмана . . . . .	161
4.4.8. Уравнение Больцмана на решетке . . . . .	162
4.5. Методы молекулярной динамики . . . . .	163
4.5.1. Основные положения метода молекулярной динамики . . . . .	163
4.5.2. Формула Грина–Кубо . . . . .	169
4.5.3. Метод атомных функций Грина в кинетике переноса тепла . . . . .	172
4.6. Фононная гидродинамика . . . . .	174
<b>Глава 5. Механизмы переноса тепла.</b>	
<b>Теплопроводность и теплопроводимость.</b> . . . . .	179
5.1. Теплопроводность в наноструктурах . . . . .	179
5.1.1. Фононы и их энергетический спектр . . . . .	180
5.1.2. Общие соотношения для теплопроводности . . . . .	181

5.1.3. Уравнение Больцмана для фононов . . . . .	181
5.2. Терропроводность 1D- и квази-1D-nanoструктур . . . . .	183
5.2.1. Общие положения . . . . .	183
5.2.2. Терропроводность квазидисперсных наноструктур . . . . .	185
5.2.3. Модели терропереноса в нанопроволоках и других квази- 1D-структурах . . . . .	187
5.2.4. Терроперенос в нанопроволоках с учетом сложности границы . . . . .	213
5.3. Терроперенос в нанотрубках . . . . .	231
5.3.1. Получение и свойства нанотрубок . . . . .	231
5.3.2. Баллистический перенос тепла в одностенных углеродных нанотрубках . . . . .	234
5.3.3. Квазибаллистический терроперенос в ОСУНТ . . . . .	237
5.3.4. Диффузионный перенос в одностенных углеродных нанотрубках . . . . .	241
5.3.5. Терроперенос в многостенных углеродных нанотрубках . . . . .	242
5.3.6. Нарушение закона Фурье в нанотрубках . . . . .	246
5.4. Квантовый перенос тепла . . . . .	250
5.5. Терропроводность 2D-nanoструктур . . . . .	261
5.5.1. Общие свойства графена . . . . .	262
5.5.2. Терропроводность графена . . . . .	264
5.5.3. Простая модель терропроводности графена . . . . .	268
5.5.4. Терропроводность нанослоев и пленок . . . . .	270
5.5.5. Терропроводность наногетероструктур . . . . .	284
5.6. Пределы терропроводности . . . . .	290
5.6.1. Нижний предел терропроводности . . . . .	291
5.6.2. Верхний предел терропроводности . . . . .	292
<b>Глава 6. Границное термосопротивление в наноструктурах . . . . .</b>	<b>294</b>
6.1. Общие представления . . . . .	295
6.1.1. Термическая контактная проводимость и термическое сопротивление . . . . .	295
6.1.2. Диффузионное термическое стягивание (термическая конракция) . . . . .	297
6.1.3. Баллистическое термическое сопротивление . . . . .	299
6.1.4. Общее термическое сопротивление . . . . .	300
6.1.5. Экспериментальное определение термического контактного сопротивления . . . . .	300
6.2. Вычисление граничного термосопротивления . . . . .	301
6.2.1. Модель акустического импеданса ( <i>AMM</i> ) . . . . .	301
6.2.2. Модель диффузионного импеданса ( <i>DMM</i> ) . . . . .	305
6.3. Термосопротивление в наноструктурах . . . . .	309
6.3.1. Общие свойства термических интерфейсных наноматериалов . . . . .	310
6.3.2. Модель терропереноса через малую область контакта между телами . . . . .	319
6.3.3. Дифракционный предел в термической проводимости . . . . .	321
6.3.4. Модель цилиндрического контакта с плоской подложкой . . . . .	325
6.3.5. Контактное термосопротивление в различных режимах . . . . .	329
6.3.6. Контактное термосопротивление в баллистическом режиме (разные материалы) . . . . .	331
6.3.7. Контактное термическое сопротивление для реальных поверхностей . . . . .	333

6.3.8. Одиночные связи . . . . .	335
6.3.9. Теплоперенос в мезоскопических структурах нанопроволока/нанотрубка—подложка . . . . .	338
6.4. Термосопротивление вnanoструктурах. Мультивязи . . . . .	342
6.4.1. Термическое контактное сопротивление в структурах нанотрубок . . . . .	342
6.4.2. Фононный теплоперенос через пересекающиеся нанотрубки (термосопротивление в узлах). . . . .	343
6.4.3. Фононный теплоперенос через компактные пеллеты пересекающихся нанотрубок . . . . .	346
6.4.4. Слабые и сильные связи в тепловых изоляционных материалах . . . . .	349
6.4.5. Термическое контактное сопротивление между структурами нанотрубок и другими нанообъектами . . . . .	353
6.5. Контактное термосопротивление вноволокнах . . . . .	355
6.6. Термическое сопротивление в мезоструктурах. Вклад многократного отражения фононов . . . . .	358
6.6.1. Наноконтакт между двумя тепловыми резервуарами . . . . .	360
6.6.2. Наноконтакт между наноструктурой и полупространством . . . . .	361
6.6.3. Определение термического контактного сопротивления. . . . .	362
6.6.4. Эффективная неравновесная температура наноструктуры. . . . .	362
6.6.5. Соотношение для контактного сопротивления . . . . .	364
6.6.6. Многократное отражение фононов в наноструктурах . . . . .	364
6.6.7. Частично баллистический режим в термическом резервуаре . . . . .	365
6.7. Термическое контактное сопротивление на сетке случайных наноконтактов . . . . .	367
6.7.1. Термическое контактное сопротивление вслучайно распределенных контактных точках . . . . .	367
6.7.2. Теплопроводность с изменением масштабов . . . . .	368
6.7.3. Контактная модель Арчарда. . . . .	369
6.8. Контактное термическое сопротивление в других наноинтерфейсах . . . . .	370
6.8.1. Нанокомпозитный интерфейс нанопроволоки Ag с полимером . . . . .	370
6.8.2. Наноинтерфейс на основе случайно расположенных нанотрубок . . . . .	373
<b>Глава 7. Термогидродинамика на мезо- и наномасштабах . . . . .</b>	<b>377</b>
7.1. Роль размерных эффектов в гидродинамике. . . . .	379
7.2. Число Кнудсена, кнудсеновский слой и особенности течений . . . . .	381
7.2.1. Медленное обтекание микросферы . . . . .	386
7.2.2. Экспериментальные результаты по обтеканию сферической частицы . . . . .	387
7.2.3. Аналитическое решение на основе уравнения Навье—Стокса . . . . .	387
7.2.4. Аналитическое решение из 13-моментного приближения Грэда . . . . .	388
7.2.5. Аналитическое решение на основе кинетической теории . . . . .	388
7.3. Кнудсеновский слой с учетом теплопереноса . . . . .	389
7.4. Гидродинамика и граничные условия . . . . .	392
7.4.1. Исторический экскурс в проблему прилипания и скольжения жидкости на поверхности твердого тела. . . . .	393
7.4.2. Базисная гидродинамическая теория . . . . .	396
7.4.3. Модель длины скольжения . . . . .	398
7.4.4. Экспериментальные методы . . . . .	400
7.4.5. Факторы, влияющие на длину скольжения. . . . .	409
7.4.6. Механизм скольжения . . . . .	410
7.5. Термогидродинамика со скольжением . . . . .	410

7.5.1. Течение между параллельными стенками . . . . .	411
7.5.2. Течение Пузейля со скольжением . . . . .	413
7.5.3. Теплообмен с условием скольжения Навье . . . . .	416
7.5.4. Тепловые граничные условия . . . . .	421
7.6. Термогидродинамика на наноструктурированной поверхности . . . . .	423
7.6.1. Варианты определения длины скольжения . . . . .	423
7.6.2. Структурные масштабы . . . . .	426
7.6.3. Особенности скольжения на наноструктурированных поверхностях . . . . .	427
7.7. Термогидродинамика внутри наноструктур . . . . .	439
7.8. Некоторые специфические проблемы термогидродинамики наноструктур . . . . .	447
7.8.1. Образование нанопены при испарении жидкости из наноструктур . . . . .	447
7.8.2. Пористые мембранны на основе управляемой структуры нанотрубок . . . . .	450
<b>Глава 8. Теплоперенос в нанокомпозитах и наножидкостях . . . . .</b>	<b>453</b>
8.1. Теплоперенос в нанокомпозитах . . . . .	453
8.1.1. Общие представления . . . . .	453
8.1.2. Теплопроводность композитов: эффективная среда . . . . .	454
8.1.3. Кинетический подход к переносу в нанокомпозитах . . . . .	462
8.1.4. Модифицированные модели эффективной среды . . . . .	465
8.1.5. Нанокомпозиты: описание вне рамок эффективной среды . . . . .	468
8.1.6. Теплоперенос в нанокомпозитах с нерегулярной структурой . . . . .	479
8.1.7. Теплоперенос в напряженных нанокомпозитах . . . . .	481
8.1.8. Теплоперенос в нанокомпозитах, содержащих нанотрубки и нановолокна . . . . .	486
8.2. Теплоперенос в наножидкостях . . . . .	495
8.2.1. Основные свойства наножидкостей . . . . .	495
8.2.2. Теплопроводность наножидкостей . . . . .	497
8.2.3. Модели для описания теплопроводности наножидкостей . . . . .	502
8.2.4. Конвективный теплообмен в наножидкостях . . . . .	513
8.2.5. Теплообмен при кипении наножидкостей . . . . .	517
<b>Глава 9. Нанотермогидродинамика поверхности . . . . .</b>	<b>528</b>
9.1. Особенности наноструктурированных поверхностей . . . . .	528
9.1.1. Особенности природных мезо- и наноструктурированных поверхностей . . . . .	530
9.1.2. Искусственные супергидрофобные поверхности . . . . .	535
9.2. Теоретические модели смачивания . . . . .	538
9.2.1. Модель Юнга . . . . .	539
9.2.2. Модели для шероховатых поверхностей: Венцеля и Касси–Бакстера . . . . .	540
9.3. Современные модели смачивания супершероховатых поверхностей . . . . .	547
9.3.1. Обобщенная теория контактных углов на супершероховатых поверхностях . . . . .	547
9.3.2. Вычисление контактных углов . . . . .	552
9.4. Процессы наnanoшероховатых и супергидрофобных поверхностях . . . . .	557
9.4.1. Супергидрофобные поверхности с нанотрубками . . . . .	558
9.4.2. Супергидрофобные поверхности с наноструктурами . . . . .	559

<b>9.5. Управление процессами смачиваемости на наношероховатых и супергидрофобных поверхностях . . . . .</b>	561
9.5.1. Электросмачивание. . . . .	563
9.5.2. Тепловое управление режимами смачиваемости. . . . .	569
9.5.3. Управление электромагнитным излучением . . . . .	571
<b>9.6. Физика кипения на наноструктурированных поверхностях . . . . .</b>	577
9.6.1. Кипение в структуре нанопроволок . . . . .	580
9.6.2. Наноструктурированные микропористые поверхности . . . . .	586
9.6.3. Наноструктурированные функциональные поверхности . . . . .	593
<b>Глава 10. Тепловое излучение в наноструктурах . . . . .</b>	600
10.1. Наномасштабный радиационный теплоперенос . . . . .	600
10.2. Флуктуации электромагнитного поля и тепловой поток . . . . .	607
10.3. Когерентный и некогерентный радиационный перенос тепла . . . . .	612
10.4. Тепловое излучение наноструктур в дальней зоне . . . . .	614
10.5. Тепловое излучение наноструктур в ближней зоне . . . . .	615
10.5.1. Тепловое излучение наночастиц. . . . .	615
10.5.2. Тепловое излучение между двумя наночастицами . . . . .	617
10.5.3. Тепловое излучение в ближнем поле с плоской поверхности. . . . .	619
10.5.4. Тепловое излучение через малый вакуумный зазор . . . . .	623
10.5.5. Тепловое излучение на малых масштабах: некоторые эксперименты . . . . .	627
10.6. Резонансное туннелирование и увеличение теплового потока . . . . .	628
10.6.1. Механизм фотонного туннелирования. . . . .	632
10.6.2. Индуцирование поверхностными поляритонами пространственной когерентности. . . . .	633
10.6.3. Микроскопические и макроскопические уравнения Максвелла . . . . .	636
10.7. Некоторые задачи наномасштабного радиационного теплообмена . . . . .	637
10.7.1. Локальный нагрев поверхности и реакция остряя сканирующего туннельного микроскопа . . . . .	637
10.7.2. Теплообмен между двумя наночастицами . . . . .	639
10.8. Экспериментальные исследования радиационного теплообмена. . . . .	642
10.8.1. Радиационный теплообмен между двумя стеклянными (диэлектрическими) параллельными пластинами . . . . .	642
10.8.2. Радиационный теплообмен между сферой и подложкой . . . . .	645
10.8.3. Радиационный теплообмен между двумя параллельными металлическими пластинами . . . . .	648
10.9. Термофотовольтоника в ближнем поле . . . . .	649
<b>Глава 11. Нанотермоэлектричество . . . . .</b>	653
11.1. Введение в термоэлектричество . . . . .	653
11.1.1. Основные понятия . . . . .	653
11.1.2. Термоэлектрические свойства стандартных материалов . . . . .	655
11.1.3. Эффективность термоэлектрического преобразования . . . . .	657
11.1.4. Теоретические основы термоэлектрического преобразования . . . . .	658
11.1.5. Термоионные системы и преобразователи. . . . .	662
11.2. Термоэлектричество наноразмерных систем . . . . .	667
11.2.1. Термоэлектрический перенос в низкоразмерных системах. . . . .	668
11.2.2. Термоэлектрические наноматериалы. . . . .	678
11.2.3. Термоэлектрические материалы — стратегия на будущее . . . . .	714
11.3. Термоэлектрические модули и их применение. . . . .	730
<b>Список литературы . . . . .</b>	738