Ballistic Diffusive Approximation에 의한 Quantum Dot Superlattice의 나노열전달 해석

김 원 갑† ·정 재 동*

Analysis of Nano-Scale Heat Conduction in the Quantum Dot Superlattice by Ballistic Diffusive Approximation

Won-Kap Kim, Jae Dong Chung

Key Words: superlattice(수퍼래티스), Equivalent Thermal Conductivity(등가열전달계수), Phonon(포논), Mean Free Path(자유이동거리), Equivalent Equilibrium Temperatrure(등가평형온도). Emitted Phonon Temperature(방사포논온도)

Abstract

Understanding the thermal conductivity and heat transfer processes in superlattice structures is critical for the development of thermoelectric materials and optoelectronic devices based on quantum structures. Chen[1] developed ballistic diffusive equation(BDE) for alternatives of the Boltzmann equation that can be applied to the complex geometrical situation. In this study, a simulation code based on BDE is developed and applied to the 1-dimensional transient heat conduction across a thin film and transient 2-dimensional heat conduction across the film with heater. The obtained results are compared to the results of the Chen[1] and Yang and Chen[1]. Finally, steady 2-dimensional heat conduction in the quantum dot superlattice are solved to obtain the equivalent thermal conductivity of the lattice and also compared with the experimental data from Borca-Tasciuc[2].

기호설명

α : 차분식 계수
A : 면적벡터(area vector)
C : 비열(specific heat)
I : 포논 강도(phonon Intensity)
k : 열전달계수
q : 열유속
v : 그룹 속도(group velocity)
s : 거리
u : 내부에너지
x, y : 직교좌표계성분

† 세종대학교 세종-록히드마틴 우주항공연구소
E-mail : wkkim@sejong.ac.kr
TEL : (02)3408-3896 FAX : (02)3408-3895
* 세종대학교 기계공학과

하첨자

b :ballistic 성분
m :diffusive 성분
w :포논 주파수(frequency)

그리스문자

ξ, η : 비직교좌표계 성분
Ω : 고체각(solid angle)
Λ : 평균자유이동거리(mean free path)

1. 서 론

마이크로 일렉트로닉(microelectronic)장치와 광전기(optoelectronic) 장치, 저차원 열전(low-dimen-sional thermoelectric)장치와 열이온 (thermionic)장치의 개발에 있어서 박막(thin film)과 수퍼래티스(superlattice)에서의 열전달현상에 대한 이해는 필

수적이다. 최근 몇 년 동안 GaAs/Al As, GaAs/AlGaAs, Si/SiGe, Si/Ge 등을 재료로 하는 수퍼래티스의 열전도계수 측정에 대한 여러 연구가 수행되었다. 그 이유는 수퍼래티스의 등가열전도도(equivalent thermal conductivity)가 같은 재료를 복합하여 만들어진 합금(composition alloy)이나 각 재료 자체의 열전도도보다 매우 작아진다는 것이 알려졌기 때문이다. 따라서 이러한 결과를 설명하기 위한 여러 가지의 이론적 모델이 개발, 적용되고 있다.

나노스케일의 해석에는 주로 Boltzmann Transport Equation (BTE)를 해석에 사용해 왔다. 그러나 이 방법을 이용한 해석은 매우 복잡하여 실제 설계에서 사용될 가능성은 희박하다. 기존에 발표된 연구에서도 주로 BTE를 사용한 해석은 1차원이나 상당히 단순화시킨 2차원 문제에서만 적용되어 왔다. Chen[1]은 Boltzmann 방정식이 1차원이나 단순한 2차원까지의 영역에 대한 해석만 가능한 것을 극복하기 위하여 Ballistic Diffusive Equation (BDE)을 제안하였다. 이 방법은 포논의 전달방정식이 복사열전달에서의 복사에너지 방정식과 유사하다는 것에 착안하여 복사열전달 해석에 사용되는 수정 P_1 근사법(modified P_1 approximation method)를 근간으로 하여 유도되었다. 수정 P_1 근사법은 벽면으로부터의 영향을 고려하는 ballistic 성분과 내부의 산란(scattering)에 의한 영향을 고려하는 diffusive성분으로 구분하여 각각 해를 구하고 다시 더하는 방법을 사용한다. 여기서 diffusive한 해의 계산에는 내부에너지에 대한 지배방정식을 구성하고 유한차분법(FDM) 또는 유한체적법(FVM)을 적용할 수 있도록 유도하였다. 반면, ballistic한 해의 계산에서는 이러한 유한차분법이나 유한체적법을 사용하지 않고 엄밀해(exact solution)을 고체각도(solid angle)에 대하여 적분하여 구하는 방법을 사용한다.

본 연구에서는 Chen[1]에 의해 개발된 BDE를 적용한 전산해석 프로그램을 개발하고 이를 2차원 quantum dot superpattice에 적용함으로써 수퍼래티스의 형상에 따른 등가열전도도의 변화를 고찰하고자 한다. 우선 개발된 코드의 검증을 위하여 1차원 박막(thin film)의 해를 BTE의 결과와 비교, 검증한다. 또 2차원 quantum dot 수퍼래티스의 열전달을 해석하고 온도에 따른 등가열전도

Table 1. Room-temperature properties of the Si/Ge superlattices.

Materia	Specific Heat $\times 10^6 J/m^3K$	Group velocity m/s	Mean Free Path Å
Si	0.93	1804	2604
Ge	0.87	1042	1986

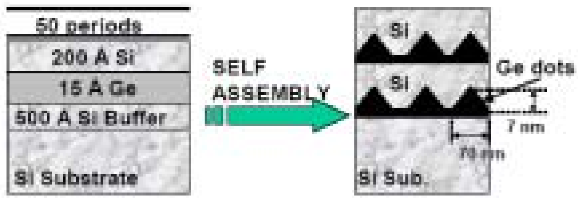


Fig.1 Schematic of the Si/Ge quantum-dots superlattice.

계수의 변화를 실험결과와 비교하여 BDE에 의한 미세척도 열전달의 가능성을 검토 하였다.

2. 이론해석

2.1 지배방정식

열전달의 매체인 포논(phonon)에 대한 지배방정식은 Boltzmann 방정식이며 일반적으로 완화시간근사(relaxation time approximation)을 적용한 방정식을 사용한다. Joshi and Majumdar[3]은 포논의 거동을 지배하는 방정식이 복사열전달에서의 지배방정식과 유사하다는 점을 이용하여 식(1)을 다음과 같이 포논 강도(intensity)에 대한 식으로 나타내었다.

$$\frac{\partial I_w}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r I_w = -\frac{I_w - I_{wo}}{\tau_w} \tag{1}$$

여기서 I_w는 포논강도로서 다음과 같이 정의된다. 경계면에서의 온도분포가 주어졌을 때 온도와 포논 강도와의 관계는 다음의 식으로부터 계산된다.

$$I^o(T) = \frac{Cv}{4\pi}(T - T_o) + I^o_{ref} \tag{2}$$

여기서는 T_o는 기준온도를 나타내며 I^o_{ref}는 기

준온도에서의 포논강도이다. 포논강도의 정의는 다음과 같다.

$$I_w(t,r,v) = |v| hwf(t,r,v)D(w)/4\pi \quad (3)$$

수정 P_1 근사법에서 영역내의 한점에서 포논강도는 경계면으로 부터의 ballistic한 에너지와 재료 내에서의 산란(scattering)에 의한 항으로 각각 분리하여 해석하고 각 결과를 다시 조합하는 방법으로 최종해를 구하게 된다. $I_w(t,r)$를 두개의 항으로 분리하면 다음과 같다.

$$I_w(t,r) = I_{bw}(t,r) + I_{mw}(t,r) \quad (4)$$

여기서, $I_{bw}(t,r)$, $I_{mw}(t,r)$은 각각 포논의 ballistic성분과 diffusive성분을 나타낸다. 식(4)를 식(1)에 대입하면 다음과 같은 두개의 방정식을 얻을 수 있다.

$$\hat{s}\cdot\nabla I_{bw} = -\frac{I_{bw}}{|v|\tau_w} \quad (5)$$

$$\hat{s}\cdot\nabla I_{mw} = -\frac{I_{mw}-I_{ow}}{|v|\tau_w} \quad (6)$$

따라서 식(5)와 식(6)를 풀어 식(4)에 대입하면 한점에서의 포논강도를 구할 수 있다. 식(5)에 대한 엄밀해는

$$I(r,\hat{s}) = I[r-(s-s)\hat{s}] \times exp\left(-\int_{s_o}^{s}\frac{ds}{|v|\tau_w}\right) \quad (7)$$

이며 고체각도과 주파수(frequency)에 대하여 적분하여 사용한다.

한편, 내부에너지를 포논강도와 마찬가지로 ballistic성분과 diffusive성분으로 나누면 이에 대한 정의는 다음과 같다.

$$u = u_b + u_m = \int_{\Omega} hwfD(w)\,dw\,d\Omega/4\pi \quad (8)$$

재료 내부에서의 열생성이 없는 경우에 내부에너지와 포논강도에 대한 관계를 이용하면 diffusive 성분에 대한 내부에너지 u_m방정식은 다음과 같이 유도된다.

$$\tau\frac{\partial^2 u_m}{\partial t^2} + \frac{\partial u_m}{\partial t} = \nabla\left(\frac{k}{C}\nabla u_m\right) - \nabla\cdot q_b \quad (9)$$

$$\vec{q_b}(t,r,s) = \int I_b(t,r,s)\hat{s}\,d\Omega \quad (10)$$

Chen[1]은 내부에너지와 온도와의 관계를 다음과 같이 정의하고 온도는 단순히 내부에너지의 크기를 나타내는 의미로 사용하고 다음과 같이 정의하였다.

$$u = u_m + u_b = C(T_m + T_b) \quad (11)$$

2.2 경계조건

BDE를 풀기 위한 경계조건은 Fig.1와 같이 계산 영역 좌우의 대칭경계면과 상하의 Si와 Ge 경계면은 캐리어의 diffusive 성분에는 영향을 주지 못하므로 diffusive한 열유속은 incident diffusive carrier만으로 구성된다. 경계면에서의 diffusive 내부에너지 u_m에 대한 경계조건은 다음과 같다.

$$\tau\frac{\partial u_m}{\partial t} + u_m = \frac{2\Lambda}{3}\nabla u_m\cdot\hat{n} \quad (12)$$

3. 수치해석

3.1 해석영역과 해석조건

Fig.2에 수퍼래티스 내의 하나의 dot를 포함하는 계산영역에 대한 격자계를 나타내었다. 계산 격자는 x, y 방향으로 각각 141로 설정하였다.

본 연구에서 해석하고자 하는 수퍼래티스는 Si와 Ge가 이루는 층들이 50개인 총두께가 1.075m인 복합물질이다. Borca-Tascluc et al[4]의 실험에서는 수퍼래티스 양단에 온도차를 가하고 수

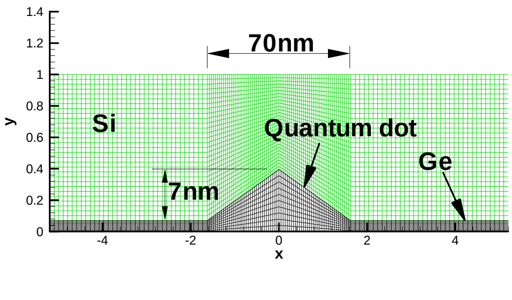


Fig.2 Grid System of the Si/Ge quantum-dots superlattice.

퍼래티스를 통과하는 열량을 측정함으로써 수직 방향 과 종방향 등가열전도계수를 측정하였다. 온도차는 각각 1.007 K 와 0.093 K로 설정하였고 이때 히터의 가열량은 각각 27.8mW, 26.5mW 이다. 계산 영역의 각 부분의 길이는 Fig. 2에서 보는 바와 같이 dot의 폭과 높이가 각각 70nm, 7 nm이며 Ge의 두께는 1.5nm, Si의 두께는 20nm 이다. Dot의 밀도는 2×10^{9} cm^{-2} 로 dot 와 dot간의 거리는 0.224μm 로 계산영역의 x방향 길이와 같다. Fig.2에서 지면에 수직방향(z)으로는 dot는 해석을 간단히 하기 위하여 2차원적인 일정한 형상을 가지는 것으로 가정하였다.

3.2 지배방정식의 차분화

Quantum dot 수퍼래티스에 대한 전산해석적인 해석을 위하여 식(7)의 diffusive 방정식을 우선 일반좌표계로 변환한뒤 차분화하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

$$a_P u_{m,P} = a_E u_{m,E} + a_W u_{m,W} + a_N u_{m,N} + a_S u_{m,S} - S_{u_m} \tag{13}$$

여기서

$$\alpha_E = \left(\frac{k}{C}\frac{\overrightarrow{A^1}\cdot\overrightarrow{A^1}}{\sqrt{g}}\right)_e,\ \alpha_W = \left(\frac{k}{C}\frac{\overrightarrow{A^1}\cdot\overrightarrow{A^1}}{\sqrt{g}}\right)_w$$

$$\alpha_N = \left(\frac{k}{C}\frac{\overrightarrow{A^2}\cdot\overrightarrow{A^2}}{\sqrt{g}}\right)_n,\ \alpha_S = \left(\frac{k}{C}\frac{\overrightarrow{A^2}\cdot\overrightarrow{A^2}}{\sqrt{g}}\right)_s$$

$$\nabla\cdot q_b = \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\left(A_1^1 q_{bx} + A_2^1 q_{by}\right)\right) + \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial\eta}\left(A_1^2 q_{bx} + A_2^2 q_{by}\right)\right)$$

이다. 윗 식에서 $\sqrt{g}$는 Jacobian으로 체적, A^i는 면적벡터(area vector)를 나타내며 A_j^i는 면적벡터 A^i의 j방향성분을 나타낸다. 식(13)은 q_b와 경계조건이 주어지면 전체 영역에 대하여 반복계산함으로써 해를 구할 수 있다.

한편, ballistic 성분의 계산은 엄밀해를 사용하므로 열유속과 내부에너지에 대한 엄밀해를 적용한다. 식(10)을 계산영역에 대하여 적용하면 영역내 한 점에서의 열유속, 내부에너지의 ballistic 성분은 다음과 같다.

$$q_{bx} = q_b\cdot i = \int I_b(\hat{s}\cdot i)\,d\Omega = \int_A I_b\frac{\triangle x}{s^4}\left[n_1\triangle x + n_2\triangle y\right]dl\cdot dz \tag{14}$$

$$q_{by} = q_b\cdot j = \int I_b(\hat{s}\cdot j)\,d\Omega = \int_A I_b\frac{\triangle y}{s^4}\left[n_1\triangle x + n_2\triangle y\right]dl\cdot dz \tag{15}$$

$$u_b = \int\frac{I_b}{v}\,d\Omega = \int_A I_b\frac{1}{s^3}\left[n_1\triangle x + n_2\triangle y\right]dl\cdot dz \tag{16}$$

여기서 I_b는 계산영역내의 한 점에서의 포논강도로서 경계면에서의 포논강도 I_W와는 다음과 같은 관계를 가진다.

$$I_b = I_W exp\left(-\frac{s}{\Lambda}\right) \tag{17}$$

식(14)-(16)의 계산에서 l은 2차원상의 경계면을 따르는 방향으로의 적분을 의미하며 z방향으로의 적분은 2차원으로 가정하여 Gauss-Legendre integration scheme을 사용하였다.

3.3 경계조건

Fig.2에서의 좌측과 우측의 대칭면 경계는 diffusive 성분에 대해서는 x-방향으로의 구배가 0인 조건을 만족시키면 충분하지만 ballistic 성분의 경우에는 엄밀해를 이용하므로 대칭면 상에서의 열유속과 내부에너지를 직접적으로 구할 수 있다. 벽면이 회색체(gray body)인 경우에는 내료내부에서의 벽면에 의한 반사(reflection)에 의해서 반복적인 계산에 의해 다음의 방사량(radiosity)를 구한다.

$$J_b = T + r\int_A J_b F_{dA-dA'}exp\left(-\frac{s}{\Lambda}\right) \tag{18}$$

여기서 방사량과 포논강도와의 관계는 회색체

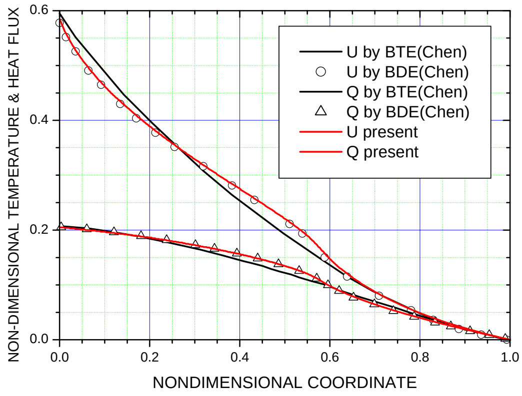


Fig.3 Comparison of the non-dimensional heat flux and temperature for thin film.

의 경우 다음과 같은 관계가 있으므로

$$J_b = \pi I_b \tag{19}$$

식(14)-(16)에 식(18)을 대입하면 회색체에 대한 열량과 에너지를 구할 수 있다.

4. 결과 및 토론.

본 연구에서는 개발된 포논 열전달 해석 프로그램을 검증하기 위하여 1차원 박막에 대한 열전달을 해석하고 그 결과를 Chen[1]의 BTE에 의한 결과와 비교한다.

Fig.3은 dot가 없는 박막에서의 1차원 열전달을 BDE로 해석한 결과로서 Knudsen 수 $(K_n = \Lambda/L)$가 1이고 무차원 시간이 1일때의 결과를 Chen(1)의 BTE, BDE에 의한 결과와 비교한 것이다. 본 연구에서 개발된 프로그램의 결과 Chen(1)의 BDE결과와 매우 잘 일치하는 결과를 보인다. Chen(1)은 BDE의 결과가 BTE의 결과와 비교했을 때 전체적으로 만족할 만한 결과를 보여주고 있기 때문에 BDE가 복잡한 BTE를 푸는 것보다는 계산이 간단하며 복잡한 기하학적형상을 가진 경우에도 적용이 가능하다고 주장하였다. 위의 결과에서 알 수 있는 것은 수정 P1 근사법은 해를 ballistic 성분과 diffusive 성분으로 구분하는 방법을 사용하며 ballistic 성분은 엄밀해로부터 구하기 때문에 Fig.3 에서 나타나는 오차는 주로 diffusive 성분에 의한 것임을 알 수 있다. 따라서 BDE의 보다 정확한 결과를 위해서는 diffusive성분에 대한 지배방정식의 유도과정에서 사용되는 가정을 제거하는 것도 좋은 연구과제라 생각된다

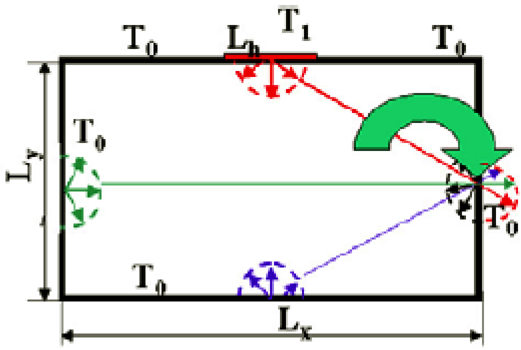


Fig.4 Schematic of the film with heater.

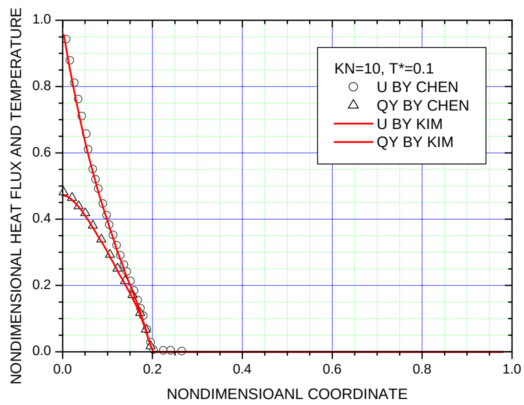
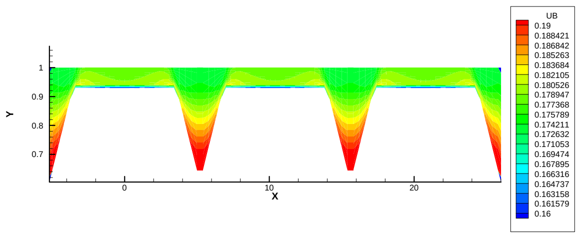


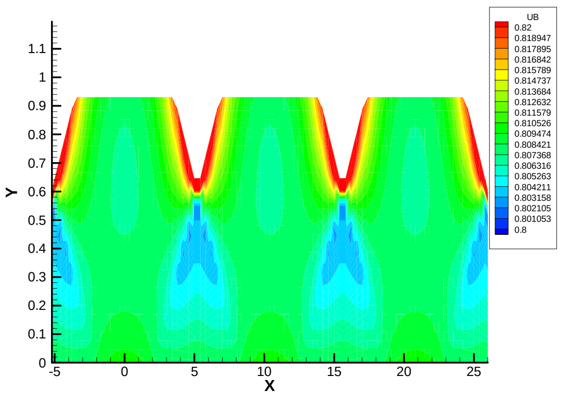
Fig.5 Comparison of the non-dimensional heat flux and temperature for 2-dimensional film with heater.

Fig.4는 2차원 히터에 의한 2차원 전도에 대한 개념도를 나타낸다. Fig.5는 대칭면상에서의 열전달율과 온도분포를 나타낸 그림으로 Yang과 Chen[2]의 결과와 잘 일치하고 있음을 알 수 있다.

Fig.5와 Fig.6은 계산된 수퍼래티스 내부의 온도분포를 나타낸다. 이 그림으로부터 quantum dot 주위의 온도가 다른 부분보다 높게 형성되고 있음을 알 수 있다. 따라서 quantum dot은 높은 온도에 의해 열전달을 방해하는 효과를 가짐을



(a)



(b)

Fig.6 Temperature distribution of superlattice. (a) Ge (b) Si

알 수 있다. 따라서 quantum dot 이 없는 경우보다 좋은 성능을 발휘할 수 있음을 알 수 있다.

5. 결 론

Ballistic diffusive equation을 적용한 2차원 포논 열전달에 대한 수치해석을 수행함으로써 다음과 같은 결론을 얻었다. 수정 P_1 근사법으로부터 유도된 BDE는 복잡한 형상에서 적용이 불가능한 BTE를 대체하는 방법으로서 기존의 유한차분법이나 유한체적법과 같은 전산해석적 방법이 가능함을 보였다. 그러나 P_1 방법이 가지고 있는 단점 즉, 확산근사(diffusion approcimation)에 의한 해의 오차발생과 ballistic 성분 계산에 엄밀해를 사용하는 방법을 도입함으로써 적용 대상의 형상에 따라 프로그램을 수정해야 하는 일반화된 전산해석 프로그램의 개발이 어렵다. 따라서 근래에 발표되는 일반화된 프로그램의 개발이 가능한 방법의 적용이 요구된다. 또한 BDE는 현재까지 많은 경우에 적용되지 못하였으며 그 정확성에 대하여도 보다 자세한 검증이 필요하다.

quantum dot은 높은 온도에 의해 열전달을 방해하는 효과를 가짐을 알 수 있다. 따라서 quantum dot 이 없는 경우보다 좋은 성능을 발휘할 수 있음을 알 수 있다.

후 기

본 논문은 한국학술진흥재단의 대학중점연구소 지원사업(No.2002-005-D20001)에 의하여 수행되었다.

참고문헌

(1) G. Chen, 2002, Ballistic Diffusive Equations for Transient Heat Conduction from Nano to Macroscales, J. Heat Transfer, vol.124, pp.320-328.

(2) R. Yang and G. Chen, 2002, Ballistic-Diffusive Equations for Multidimensional Nanoscale Heat Conduction, 12th Int. Heat Transfer Conference, Grenoble, France, Aug. 18-23.

(3) A. A. Joshi and A. Majumdar, 1993, Transient Ballistic and Diffusive Phonon Heat Transport in Thin Films, J. Appl. Phys., vol.74, No.1, pp.31-39.

(4) T. Borca-Tasciuc and W. Liu, J. Liu, K. L. Wang, G. Chen, 2000, Anisotropic Thermal Conductivity of a Si/Ge Quantum Dot Superlattice, ASME HTD, vol.366-2, pp.381-384.

(5) D. B. Olfe, 1967, A Modifications of the Differential Approximation for Radiative Transfer, AIAA Journal, vol.5, No.4, pp.638-643.

(6) T. Zeng and G. Chen, 2001, Phonon Heat Conduction in Thin Films: Impacts of Thermal Boundary Resistance and Internal heat Generation, J. Heat Transfer, vol.123, pp.340-347.

(7) G. Chen, 1997, Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures, J. Heat Transfer, vol.119, pp.220-229.

(8) G. Chen, 1998, Thermal Conductivity and Ballistic-Phonon Transport in the Cross-Plane Direction of Superlattices, Physical Review B, vol.37, No.23, pp.14958-14973.

(9) Pomraning, G. C., 1973, The Equation of Radiation Hydrodynamics, Pergamon, New York