

<학술논문>

DOI <https://doi.org/10.3795/KSME-B.2017.41.5.341>

ISSN 1226-4881(Print)  
2288-5324(Online)

## 포논 기체 운동론을 이용한 실리콘 내 포논 평균자유행로 스펙트럼 열전도율 기여도 예측

진 재 식<sup>\*†</sup>

\* 조선이공대학교 기계설계과

### Prediction of Spectral Phonon Mean Free Path Contribution to Thermal Conduction in Silicon Using Phonon Kinetic Theory

Jae Sik Jin<sup>\*†</sup>

\* Dept. of Mechanical Design, Chosun College of Science & Technology

(Received December 21, 2016 ; Revised January 20, 2017 ; Accepted January 20, 2017)

**Key Words:** Kinetic Theory(기체 운동론), Phonon Mean Free Path(포논 평균자유행로), Thermal Conductivity(열전도율), Silicon Thin Film(실리콘 박막)

**초록:** 본 연구는 해석적 접근이 용이한 실리콘 내 포논 평균자유행로(mean free path, MFP) 스펙트럼(spectrum) 열전도 특성 예측 모델을 제시했다. 해석이 용이한 포논 기체 운동론(kinetic theory)을 적용하기 위해, 나노구조물의 현상학적 접근으로 열전도에 관여하는 포논 모드(mode)들만 추출하고, 300 K의 실리콘에 대한 포논의 분산관계(dispersion relations) 및 분극(polarization) 효과가 고려된 포논의 주파수 변화에 따른 비열(specific heat)과 군속도(group velocity) 및 MFP 정보를 사용했다. 300 K의 실리콘 내 포논의 MFP 스펙트럼 열전도율 기여를 계산하고, 기존 실험결과 및 제1원리 기법 결과와 비교하여, 본 방법의 타당함을 보였다. 본 연구를 통해, 나노구조물 열전달 해석모델 개발 및 나노재료 열전달 특성 조정(tailoring) 전략 설계에 필요한 포논 MFP 스펙트럼 열전도 특성 정보를 해석이 용이한 방법으로 구할 수 있는 방법을 제공했다.

**Abstract:** Knowing the mean free paths (MFPs) of thermal phonons is an essential step in performing heat transfer analysis for nanomaterials, and in determining the optimum design for tailoring the heat transfer characteristics of nanomaterials. In this study, we present a method that can be used to calculate accurately the phonon MFP spectra of nanostructures based on simple phonon kinetic theory. Here, the kinetic theory may be employed by extracting only the diffusive-transport part of the phonon spectrum (i.e., the MFPs are less than a thermal length). By considering phonon dispersion and polarization effects, the phonon MFP distributions of silicon at room temperature are calculated from phonon transport properties and the spectral MFP. Our results are validated by comparison with those of the first principle and MFP spectroscopy data.

- 기호설명 -

$C$  : 비열(J/m<sup>3</sup>K)

$c$  : 포논 분산관계를 정의하는 상수

$\hbar$  :  $2\pi$ 로 규준화된 플랑크 상수(Js)

$K$  : 열전도율(W/mK)

$k$  : 파수(1/m)

$k_B$  : 볼츠만 상수( $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$  J/K)

$L_c$  : 박막 두께 (m)

$T$  : 온도(K)

$v_g$  : 포논 군속도(m/s)

$v_s$  : 포논 분산관계를 정의하는 상수

그리스문자

$\Lambda$  : 평균자유행로(m)

$\omega$  : 진동수(1/s)

† Corresponding Author, jinjs@cst.ac.kr

© 2017 The Korean Society of Mechanical Engineers

하첨자

$EQ$  : 열적 평형 상태

$NEQ$  : 열적 비평형 상태

## 1. 서 론

반도체 및 절연체(dielectric) 내 주요 에너지 전달체(carrier)는 포논(phonon)이며, 포논은 결정체(crystal) 격자(lattice)의 열을 전달하는 양자화된 진동 형태를 갖는다.<sup>(1~5)</sup> 이러한 포논 전달특성 연구는 나노시스템 효율을 높이기 위한 설계 및 열전달 물리를 이해하는데 매우 중요하다.<sup>(1~7)</sup> 특히, 나노제작기술(nano-fabrication technology)의 발달에 힘입어 시스템 특성길이 수 nm~수십 nm에 이르는 점(dot), 선(wire), 박막(thin film) 등 다양한 형태의 나노재료 제작 및 활용이 가능해졌다.<sup>(4~6)</sup> 포논의 평균자유행로(mean free path, MFP)와 시스템 길이가 비슷하거나 작아지면, 크기 효과(size effect)에 의해 열전달 메커니즘이 확산(diffuse)이 아닌 벌리스틱(ballistic) 포논 전달 현상이 되며, 포논-경계 산란(scattering)이 중요해 진다.<sup>(8~14)</sup> 이러한 벌리스틱 포논 전달특성 이해는 나노 시스템의 효율 향상 설계에 매우 중요하다.

최근 포논 MFP의 스펙트럼(spectrum) 분포에 대한 실험적 측정 기술이 개발됐고,<sup>(13~15)</sup> 수치적 연구도 활발한데,<sup>(16,17)</sup> 이러한 포논 MFP 스펙트럼 열전도율 기여도에 대한 정보는 실리콘 박막(silicon-on-insulator) 소자 및 LED(light emitting diode)와 같이 박막 실리콘 재료를 사용하는 제품의 열 소산(dissipation) 설계에서 중요하며, 또한, 열전(thermoelectrics) 소재의 효율 향상을 위한 해법을 제공해 줄 수 있다.<sup>(16)</sup>

수치적 방법 중 하나인 제1원리(first principle) 기법은 포논 전달을 이해하는데 매우 유용하지만, 비싼 계산 비용과 복잡한 계산 과정이라는 단점 외에도 연구 그룹에 따라 조금씩 불일치한 결과가 발표되고 있다.<sup>(18,19)</sup> 특히, 포논 스펙트럼 비조화 이완시간(relaxation time) 계산에서 매우 중요한 포논 산란의 비조화성(anharmonicity) 절단거리(cutoff distances) 의존성이 명확하지 않다.<sup>(20,21)</sup> 한편, 볼츠만 수송방정식(Boltzmann transport equation, BTE)이 포논 전달 해석에 폭넓게 적용되고 있으나,<sup>(11,12,22,23)</sup> 실제공간(real space) 및 위상공간(phase space)에 대한 적분-미분 형태로 그 해석이 매우 복잡하다.<sup>(24)</sup>

본 연구에서는 해석적 접근이 용이한 포논 기체 운동론(kinetic theory)을 이용하여, 온도 300 K의 실

리콘 내 포논의 MFP 스펙트럼 분포별 열전도 기여도 예측법을 제시했다. Lee 등<sup>(25)</sup>의 연구에 의하면, 포논의 스펙트럼 특성을 잘 고려하면, 포논 기체 운동론으로 포논 MFP를 예측할 수 있다. 본 연구는 이점에 착안하여, 포논의 스펙트럼 특성인 분산관계(dispersion relation)와 분극(polarization)효과를 고려하여, 열역학적 평형과 관련 있는 포논 MFP의 열전도 기여도를 현상학적 접근(phenomenological approach) 및 포논 기체 운동론을 이용하여 계산하고, 계산결과를 기존 실험결과 및 제1원리 기법 결과와 비교하여, 본 방법의 타당함을 보이고, 상온에서 실리콘 박막 두께 변화에 따른 포논의 MFP스펙트럼 별 열전도율 기여도를 살폈다.

## 2. 해석 방법

2.1 해석 모델: 포논 기체 운동론(kinetic theory)  
기체 운동론에 따르면, 포논에 의한 열전도율( $K$ )은 다음과 같이 표현할 수 있다.<sup>(1,2)</sup>

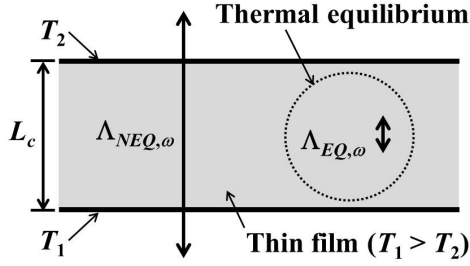
$$K = \frac{1}{3} C v_g \Lambda, \quad (1)$$

여기서  $C$ 는 포논의 비열,  $v_g$ 는 포논의 군속도,  $\Lambda$ 는 포논의 MFP를 나타낸다. 이 포논 기체 운동론은 열역학적 평형을 가정할 수 있는 경우에만 적용 가능함<sup>(1,2)</sup>을 인지하는 것이 매우 중요하다. 식 (1)에서 포논 스펙트럼 특성을 자세히 고려하기 위해, BTE로부터 열역학적 평형과 이완시간 가정(relaxation time approximation)<sup>(1)</sup>을 적용하면, 포논 기체 운동론 근간의 다음 식을 유도할 수 있다.<sup>(2)</sup>

$$K_\omega = \frac{1}{3} \int C_\omega v_{g,\omega} \Lambda_{EQ,\omega} d\omega, \quad (2)$$

여기서 하첨자  $\omega$ 는 포논 주파수를 의미하며, 하첨자  $EQ$ 는 열역학적 평형을 강조하기 위함이다. (식 (2)의 인자들 중에서 열역학적 평형과 관련된 인자는 MFP뿐임).

실리콘 내 포논의 MFP 분포는 수 nm~수십  $\mu\text{m}$ 까지 매우 폭넓게 존재함이 잘 알려져 있다.<sup>(14,20)</sup> 포논의 MFP 크기에 따라 열전달 기여가 크게 달라지는데, Fig. 1에 도식으로 표현됐듯이,  $\Lambda_\omega > L_c$  인 경우, 벌리스틱 포논 전달로 열전달에 기여하지 못하고, 추가적인 열적 저항으로 작용한다.<sup>(9,25)</sup> 이 추가된 열적 저항의 영향을 나타내기 위해, 일반적으로 Knudsen 수의 함수로 표현되는 억제 함수(suppression function)를 이용하는데,<sup>(12,13)</sup> 본 연구에



**Fig. 1** Schematic diagram of the thin film and diffusive-transport part of the phonon spectrum (i.e., their MFPs are less than a system length).  $\Lambda_{NEQ}$  and  $\Lambda_{EQ}$  are the phonon MFP responding to non-equilibrium and equilibrium states, respectively

서는 포논의 열적 평형 기여 관점에서,  $\Lambda_\omega \leq L_c$ 인 포논 모드(mode)만 열전도에 관여한다고 가정하고, Fig. 1의 현상학적 접근으로 다음과 같이  $\Lambda_\omega > L_c$ 인 포논의 열전도 기여를 배제한다.

$$\begin{aligned} \Lambda_{EQ,\omega} &= L_c & \text{if } \Lambda_\omega > L_c \\ \Lambda_{EQ,\omega} &= \Lambda_\omega & \text{if } \Lambda_\omega \leq L_c. \end{aligned} \quad (3)$$

최종적으로, 포논의 분극 효과인 세로(longitudinal) 갈래(branch)와 축퇴한(degenerate) 2개의 가로(transverse) 갈래를 고려하기 위한  $\Lambda_\omega$ 의 포논의 스펙트럼 열전도율  $K_\omega$ 는 다음으로 구할 수 있다.

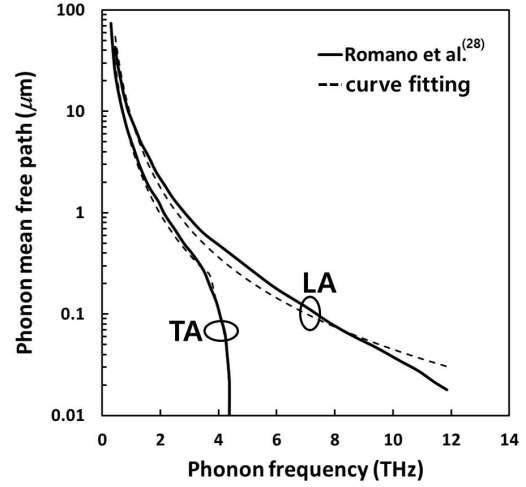
$$K_\omega = \frac{1}{3} \left( \int_{LA} C_\omega v_{g,\omega} \Lambda_{EQ,\omega} d\omega + 2 \int_{TA} C_\omega v_{g,\omega} \Lambda_{EQ,\omega} d\omega \right), \quad (4)$$

여기서 LA는 포논의 세로 갈래, TA는 가로 갈래를 의미한다.

## 2.2 포논 분산관계를 고려한 물성 계산: 비열과 균속도

본 절은 식 (4) 계산을 위한 포논 스펙트럼 비열( $C_\omega$ )과 균속도( $v_{g,\omega}$ ) 계산 방법을 논한다. 실리콘 격자 구조는 등방성이라고 가정했다.<sup>(14,26)</sup>  $v_{g,\omega}$ 는  $v_{g,\omega} = \partial\omega / \partial k$  으로 정의되며,<sup>(1-3)</sup> 여기서  $k$ 는 포논 파수(wave number)이다. Pop 등<sup>(27)</sup>이 제시한 실리콘 분산관계인  $\omega = v_s k + ck^2$ 를 이용하여,  $v_{g,\omega}$ 를 계산했다(여기서,  $v_s$ 와  $c$ 는 LA의 경우,  $v_s = 9.01 \times 10^5$  cm/s,  $c = -2 \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/s; TA의 경우,  $v_s = 5.23 \times 10^5$  cm/s,  $c = -2.26 \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/s임<sup>(27)</sup>).

포논의 비열  $C_\omega$ 은 온도 변화에 대한 포논 에너지 변화로 정의되는데, 다음으로 구할 수 있다.<sup>(22)</sup>



**Fig. 2** Calculated spectral phonon mean free path by Romano et al.<sup>(28)</sup> for different phonon polarizations. Dashed lines are curve fittings (TA: Transverse acoustic branch; LA: Longitudinal acoustic branch)

$$C_\omega = \int \frac{\hbar \omega^2 k^2 e^{\hbar\omega/k_B T} dk}{\Delta k 2\pi^2 k_B T^2 (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}, \quad (5)$$

여기서  $\hbar$ 는  $2\pi$ 로 표준화된 플랑크 상수이고,  $k_B$ 는 볼츠만 상수이다.

## 2.3 포논 MFP와 열전달 스펙트럼 관계

본 절은 식 (4) 계산을 위한  $\Lambda_{EQ,\omega}$  계산 방법에 대해 논한다. Romano 등<sup>(28)</sup>은 제1원리 기법으로 300 K 실리콘에 대한 포논 스펙트럼 별 MFP 분포를 구했다. 이 결과로부터, 곡선 맞춤(curve fitting)식을 구하면, LA에 대해서는  $\Lambda_{EQ,\omega} = 8.5890 \omega^{2.2817}$ ; TA에 대해서는 3.9 THz를 기준으로  $\omega < 3.9$  THz일 경우,  $\Lambda_{EQ,\omega} = 4.6181 \omega^{2.2586}$ ;  $\omega \geq 3.9$  THz일 경우,  $\Lambda_{EQ,\omega} = -0.2551 \omega + 1.1336$  관계를 찾을 수 있다. 이 곡선 맞춤 결과를 Romano 등<sup>(28)</sup>의 결과와 비교하여 Fig. 2에 나타냈고, 모든 경우에 대해 0.98 이상의  $R^2$  값을 보인다.

## 2.4 포논 전달 및 산란에 적용된 가정

Yang 등<sup>(29)</sup>과 Cuffe 등<sup>(30)</sup>의 연구와 같이, 포논-표면경계(phonon-boundary) 산란에서 경계 산란에 의한 포논 MFP 축소만 고려하고, 파(wave) 얽매임(confinement) 효과와 같은 포논 얽매임 효과는 무시했다. 또한, 최근 실험적으로 밝혀진 바와 같이,<sup>(14,30-32)</sup> 300 K 온도에서 실리콘 표면의 포논 산란은 주로 확산 반사(diffuse reflection) 형태로 이루어진다고 가정했다. 한편, 상온 이상에서 포논-포

논 산란이 주요 산란 메커니즘이므로,<sup>(32,33)</sup> 포논-점결점(point defect) 산란과 포논-동위원소(isotope) 산란은 무시했다. 그리고 광 포논(optical phonon)의 열전도 기여도는 무시할 정도로 작으므로 무시했다.<sup>(11)</sup>

### 3. 실리콘 내 포논 MFP 스펙트럼 열전도율 예측 결과

Wang 등<sup>(16)</sup>은 제1원리 기법과 격자운동(lattice dynamics) 기법을 적용하여 80~800 K 온도범위 에 대한 실리콘 박막의 여러 두께 변화에 따른 포논 MFP 스펙트럼 별 열전도율 기여를 예측했다. 본 연구에서  $\Lambda_\omega \leq L_c$ 인 포논 모드(mode)만 열전도에 관여한다고 가정하였으므로, 초박막(ultra-thin film)에 적용하기에는 한계가 있다. 따라서 100 nm 이상의 두께에 대한 계산만 Wang 등<sup>(16)</sup>의 결과와 비교하여 Fig. 3에 나타냈다. 실리콘 두께가 130.3 nm와 1303 nm에 대해서는 예측결과가 잘 맞으나, 벌크(bulk)의 경우는 Wang 등<sup>(16)</sup>의 결과와 다소 차이가 있다(여기서, 벌크는  $L_c = 3\mu\text{m}$ 로 정의함). Wang 등<sup>(16)</sup>의 해석 방법은 원자 단위의 열적 거동을 바탕으로 하는 제1원리 기법과 격자운동 기법을 근간으로 계산하는 방식이다. 따라서, 벌크 계산에는 어느 정도 정확성에 한계가 있을 것으로 판단된다. 이를 뒷받침하기 위해 Minnich<sup>(14)</sup>의 mean free path spectroscopy 측정법으로 구한 벌크 결과를 Fig. 3에 비교해 보았고, 벌크의 경우, 본 연구결과가 타당함을 알 수 있다. 실리콘 박막 두께 변화에 따른 포논 MFP 스펙트럼 열전도 기여를 살펴보면, 예상된 바와 같이, 박막 두께가 얇을 수록 짧은 MFP의 포논의 열전도 기여가 상대적으로 증가한다.

본 연구의 목적은 해석이 용이한 포논 기체 운동론을 이용하여, 실리콘 내 포논 평균자유행로 스펙트럼 열전도율 기여도를 예측하는 방법을 제시하는 것이다. 이 제시된 방법을 적용하기 위해서는 포논의 분산관계 및 분극효과가 고려된 포논의 주파수 변화에 따른 비열, 군속도 및 MFP에 대한 정보가 필요한데, 현재 실리콘 재료에 대해 이러한 정보들에 대해 실험적으로나 수치적 방법으로 알려져 있는 온도 범위가 300 K이기 때문에 본 연구에서는 이 온도에 대한 결과를 제시했다. 일반적으로 박막 두께가 얇아질수록 포논-표면경계 산란이 강해지므로, 포논 전달 특성에 대한 온도 변화 영향은 작아질 것으로 예상되며, 저온 영역에서는 높은 에너지의 포논 발생이 적어지므로,

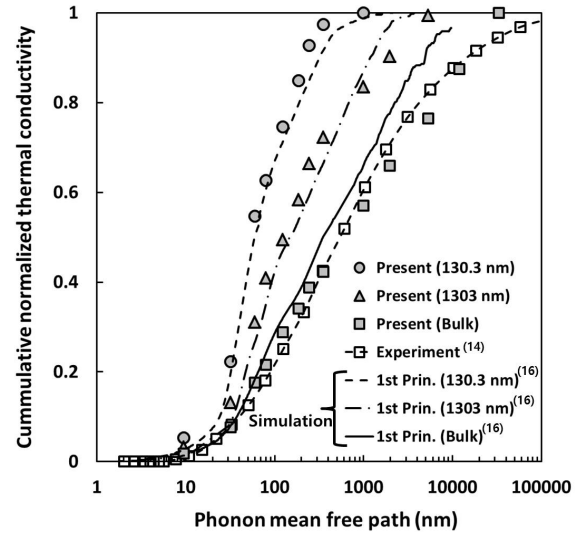


Fig. 3 Comparison of cumulative normalized thermal conductivity as a function of phonon mean free path

긴 MFP(즉, 파장이 긴) 포논들이 열전달에 주도적인 역할을 하게 된다. 반면, 온도가 높아지면, 포논-포논 산란이 복잡해져, 3-포논(three-phonon) 산란 보다는 4-포논(four-phonon) 산란 현상이 중요해져, 음향 포논들의 MFP가 전체적으로 줄어들게 되고, 10 nm 정도로 짧은 MFP를 가지는 광 포논의 열전달 기여도가 중요해질 수 있다.

### 4. 결론

지금까지 해석적 방법으로 실리콘 내 포논 MFP 스펙트럼 열전도율 기여도 예측은 복잡한 제1원리 기법으로 수행되어 왔다. 본 연구에서는 해석적 접근이 용이한 포논 기체 운동론을 바탕으로 온도 300 K의 실리콘 내 포논의 MFP 스펙트럼 분포 별 열전도 기여도 예측법을 제시했다. 포논의 스펙트럼 특성을 잘 고려하면, 포논 기체 운동론으로 포논 MFP를 예측할 수 있다는 점에 착안하여, 포논의 스펙트럼 특성인 분산관계와 분극 효과를 고려하여, 열역학적 평형과 관련 있는 포논 모드를 현상학적 접근으로 구하고, 포논 기체 운동론으로 포논 MFP 스펙트럼 열전도 기여도를 계산했다. 계산결과를 기존 실험결과 및 제1원리 기법 결과와 비교하여, 본 방법의 타당함을 보이고, 기존 제1원리 기법의 한계인 벌크 상태 예측의 우수함을 보였다. 또한, 상온에서 실리콘 박막 두께 변화에 따른 포논의 MFP스펙트럼 별 열전도율 기여도를 살펴보았다. 본 연구에서 제시한 방법은 절연체 및 반도체와 같이 포논이 주 에너지 전달체인 재료에

적용 가능한데, 다른 재료에 본 연구 방법을 적용하기 위해서는 포논의 분산관계 및 분극효과가 고려된 포논의 주파수 변화에 따른 비열, 군속도, 평균자유행로에 대한 정보가 필요하다. 또한, 열역학적 평형을 이루어 열전달에 기여하는 포논 모드(mode)들만을 추출하기 위해서는 2.4절에 정리된 가정들을 적용할 수 있는 재료에 적용 가능하다.

참고문헌  
(References)

- (1) Tien, C. L., Majumdar, A. and Gerner, F. M., 1998, *MICROSCALE ENERGY TRANSPORT*, Taylor & Francis, Washington D. C., pp. 3~94.
- (2) Chen, G., 2005, *Nanoscale Energy Transport and Conversion*, Oxford University Press, New York.
- (3) Zhang, Z. M., 2007, *Nano/Microscale Heat Transfer*, Mc Graw Hill, New York, pp. 162~182.
- (4) Kim, W., 2015, "Strategies for Engineering Phonon Transport in Thermoelectrics," *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 3, No. 10, pp. 10336~10348.
- (5) Minnich, A. J., 2015, "Advances in the Measurement and Computation of Thermal Phonon Transport Properties," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 27, No. 5, Paper Number 053202.
- (6) Park, H. J., Nah, J. H., Tutuc, E. and Seol, J. H., 2015, "Thermal Conductivity Measurement of Ge-Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub> Core-Shell Nanowires Using Suspended Microdevices," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 39, No. 10, pp. 825~829.
- (7) Kang, H.-S., Koh, Y. H. and Jin, J. S., 2016, "A Numerical Study on the Anisotropic Thermal Conduction by Phonon Mean Free Path Spectrum of Silicon in Silicon-on-Insulator Transistor," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 40, No. 2, pp. 111~117.
- (8) Jin, J. S., 2016, "Direct Determination of Spectral Phonon-Surface Scattering Rate from Experimental Data on Spectral Phonon Mean Free Path Distribution," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 40, No. 9, pp. 621~627.
- (9) Siemens, M. E., Li, Q., Yang, R., Nelson, K. A., Anderson, E. H., Murnane, M. M. and Kapteyn, H. C., 2010, "Quasi-ballistic Thermal Transport from Nanoscale Interfaces Observed using Ultrafast Coherent Soft X-ray Beams," *Nature Materials*, Vol. 9, No. 1, pp. 26~30.
- (10) Maznev, A. A., Johnson, J. A. and Nelson, K. A., 2011, "Onset of Nondiffusive Phonon Transport in Transient Thermal Grating Decay," *Physical Review B*, Vol. 84, No. 19, Paper Number 195206.
- (11) Minnich, A. J., Chen, G., Mansoor, S. and Yilbas, B. S., 2011, "Quasiballistic Heat Transfer Studied using the Frequency-dependent Boltzmann Transport Equation," *Physical Review B*, Vol. 84, No. 23, Paper Number 235207.
- (12) Collins, K. C., Maznev, A. A., Tian, Z., Esfarjani, K., Nelson, K. A. and Chen, G., 2013, "Non-diffusive Relaxation of a Transient Thermal Grating Analyzed with the Boltzmann Transport Equation," *Journal of Applied Physics*, Vol. 114, No. 10, Paper Number 104302.
- (13) Minnich, A. J., Johnson, J. A., Schmidt, A. J., Esfarjani, K., Dresselhaus, M. S., Nelson, K. A. and Chen, G., 2011, "Thermal Conductivity Spectroscopy Technique to Measure Phonon Mean Free Paths," *Physical Review Letters*, Vol. 107, No. 9, Paper Number 095901.
- (14) Minnich, A. J., 2012, "Determining Phonon Mean Free Paths from Observations of Quasiballistic Thermal Transport," *Physical Review Letters*, Vol. 109, No. 20, Paper Number 205901.
- (15) Johnson, J. A., Maznev, A. A., Cuffe, J., Eliason, J. K., Minnich, A. J., Kehoe, T., Torres, C. M. S., Chen, G. and Nelson, K. A., 2013, "Direct Measurement of Room-Temperature Nondiffusive Thermal Transport Over Micron Distances in a Silicon Membrane," *Physical Review Letters*, Vol. 110, No. 2, Paper Number 025901.
- (16) Wang, X. and Huang, B., 2014, "Computational Study of In-Plane Phonon Transport in Si Thin Films," *Scientific Reports*, Vol. 4, Paper Number 6399.
- (17) Feng, T. and Ruan, X., 2014, "Prediction of Spectral Phonon Mean Free Path and Thermal Conductivity with Applications to Thermoelectrics and Thermal Management: A Review," *Journal of Nanomaterials*, Vol. 2014, Paper Number 206370.
- (18) Maznev, A. A., 2013, "Onset of Size Effect in Lattice Thermal Conductivity of Thin Films," *Journal of Applied Physics*, Vol. 113, No. 11, Paper Number 113511.
- (19) Jiang, P., Lindsay, L. and Koh, Y. K., 2016, "Role of Low-energy Phonons with Mean-free-paths > 0.8 μm in Heat Conduction in Silicon," *Journal of Applied Physics*, Vol. 119, No. 24, Paper Number 245705.
- (20) Esfarjani, K., Chen, G. and Stokes, H. T., 2011, "Heat Transport in Silicon from First-principles Calculations," *Physical Review B*, Vol. 84, No. 8, Paper Number 085204.
- (21) Shiga, T., Aketo, D., Feng, L. and Shiomi, J., 2016, "Harmonic Phonon Theory for Calculating Thermal Conductivity Spectrum from First-principles Dispersion Relations," *Applied Physics Letters*, Vol. 108, No. 20, Paper Number 201903.
- (22) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2004, "Submicron Heat Transfer Model in Silicon Accounting for Phonon Dispersion and Polarization," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 126, No. 6, pp. 946~955.

- (23) Jin, J. S., 2014, "Prediction of Phonon and Electron Contributions to Thermal Conduction in Doped Silicon Films," *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 28, No. 6, pp. 2287~2292.
- (24) Hua, C. and Minnich, A. J., 2015, "Semi-analytical Solution to the Frequency-dependent Boltzmann Transport Equation for Cross-plane Heat Conduction in Thin Films," *Journal of Applied Physics*, Vol. 117, No. 17, Paper Number 175306.
- (25) Lee, J., Lim, J. and Yang, P., 2015, "Ballistic Phonon Transport in Holey Silicon Nano Letters," Vol. 15, No. 5, pp. 3273~3279.
- (26) Mittal, A. and Mazumder, S., 2010, "Monte Carlo Study of Phonon Heat Conduction in Silicon Thin Films Including Contributions of Optical Phonons," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 132, No. 5, Paper Number 052402.
- (27) Pop, E., Dutton, R. W. and Goodson, K. E., 2005, "Monte Carlo Simulation of Joule Heating in Bulk and Strained Silicon," *Applied Physics Letters*, Vol. 86, No. 8, Paper Number 082101.
- (28) Romano, G. and Grossman, J. C., 2015, "Heat Conduction in Nanostructured Materials Predicted by Phonon Bulk Mean Free Path Distribution," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 137, No. 7, Paper Number 071302.
- (29) Yang, F. and Dames, C., 2013, "Mean Free Path Spectra as a Tool to Understand Thermal Conductivity in Bulk and Nanostructures," *Physical Review B*, Vol. 87, No. 3, Paper Number 035437.
- (30) Cuffe, J., Eliason, J. K., Maznev, A. A., Collins, K. C., Johnson, J. A., Shchepetov, A., Prunnila, M., Ahopelto, J., Torres, C. M. S., Chen, G. and Nelson, K. A., 2015, "Reconstructing Phonon Mean-free-path Contributions to Thermal Conductivity using Nanoscale Membranes," *Physical Review B*, Vol. 91, No. 24, Paper Number 245423.
- (31) Duda, J. C., Beechem, T. E., Smoyer, J. L., Norris, P. M. and Hopkins, P. E., 2010, "Role of Dispersion on Phononic Thermal Boundary Conductance," *Journal of Applied Physics*, Vol. 108, No. 7, Paper Number 073515.
- (32) Jain, A., Yu, Y.-J. and McGaughey, A. J. H., 2013, "Phonon Transport in Periodic Silicon Nanoporous Films with Feature Sizes Greater Than 100 nm," *Physical Review B*, Vol. 87, No. 19, Paper Number 195301.
- (33) Kremera, R. K., Grafa, K., Cardonaa, M., Devyatikh, G. G., Gusevb, A. V., Gibin, A. M., Inyushkinc, A. V., Taldenkove, A. N. and Pohl, H.-J., 2004, "Thermal Conductivity of Isotopically Enriched  $^{28}\text{Si}$ : Revisited," *Solid State Communications*, Vol. 131, No. 8, pp. 499~503.