

## АНОТАЦІЯ

*Мироненко І.В.* Кінетика процесів перенесення фононів і магнонів в гетерогенних наноструктурах – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія (Галузь знань 10 – Природничі науки). – Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна Міністерства освіти та науки України, Харків, 2023.

Перенесення тепла через багатошарові гетероструктури - це процес передачі тепла через матеріали, які складаються зі шарів різних матеріалів або гетероструктур. Цей процес дуже важливий у багатьох сферах, включаючи електроніку, фізику конденсованого стану, енергетику та інші галузі. Він має важливий вплив на ефективність різних пристроїв і технологій. В електронних пристроях, таких як транзистори і інтегральні схеми, тепло може передаватися електронами через границі між шарами гетероструктури. Важливо контролювати цей процес, оскільки перегрів може призвести до втрати продуктивності і зниження довговічності пристроїв.

*Дисертація присвячена* кінетичному аналізу поперечного перенесення тепла в різних гетерогенних наноструктурах. Науковий аспект проблеми теплопровідності багатошарових систем полягає в тому, що закон Фур'є  $Q = -k\nabla T$ , який пов'язує потік тепла з градієнтом температури, не може бути безпосередньо застосований для аналізу теплоперенесення в шаруватих наноструктурах, де довжина вільного пробігу фононів більша або порівнянна з товщинами шарів і де суттєвий вплив на теплоперенесення надають умови на межі суміжних матеріалів. Таким чином, для опису потоків тепла в наноструктурах потрібен мікроскопічний підхід, який, зокрема, дозволяє врахувати вплив міжшарових меж на теплопровідність багатошарової гетероструктури. Аналіз поперечної теплопровідності шаруватої гетероструктури заснований на кінетичному рівнянні Больцмана для фононної функції розподілу, а також на припущеннях, що електрони на плівці

термалізовані внаслідок електрон-електронних зіткнень і мають температуру. Оскільки переніс тепла через границю "метал-діелектрик" здійснюється фононами, в аналізі важливу роль відіграють граничні умови для функції розподілу фононів. Ці умови повинні враховувати як відбиття фононів від границь шару, так і обмін фононами між металом і діелектриком. Температура середовища вважається досить низькою, щоб, по-перше, електрони можна було розглядати як термалізовані, по-друге, не зважати на зіткнення фононів з дефектами решітки і з іншими фононами і, по-третє, не зважати на процеси перекидання при електрон-фононних зіткненнях. Крім того, виникла галузь магнетонної спітроніки, що займається структурами, пристроями та схемами, які використовують спінові струми, що переносяться магнетонами, кванто-спінових хвиль. Подібно до звичайних електричних струмів, струми на основі магнетонів можуть використовуватися для перенесення, транспортування і обробки інформації як альтернатива спітронним пристроям, керованим зарядовим струмом. Нещодавно для реалізації ефективних логічних пристроїв було запропоновано чисті магнетонні спінові струми в ізоляційних феромагнетиках, що відрізняються відсутністю Джоулевого нагрівання та зменшеним затуханням спінової хвилі. У той же час спінові хвилі можуть переносити тепло так само, як збудження решітки (фонони) переносять тепло через збурення положень атомів.

Дисертаційна робота містить п'ять розділів.

У *першому розділі* в рамках теорії акустичної неузгодженості між твердими тілами обговорюється роль електронів провідності в формуванні ефективної акустичної прозорості інтерфейсу між вузькими металевими плівками і діелектричними підкладками з високою теплопровідністю. Розглянуто випромінювання фононів з металевих плівок, що нагріваються струмом за низьких температур. Теоретичний розгляд цих задач проведено з використанням кінетичних рівнянь для фононної та електронної функцій розподілу. У більшості випадків обговорено зв'язок між теоретичними результатами та існуючою експериментальною ситуацією.

Розглянуто результати роботи [118], де теоретично досліджено нелінійну релаксацію між магнонами та фононами в ізоляційному феромагнетику. Магнони і фонони описувалися рівноважними розподілами Бозе-Ейнштейна з різними температурами. Нелінійний тепловий потік від магнонів до фононів розраховано мікроскопічно в термінах черенковського випромінювання фононів магнонами. Отримані результати в роботі [118] у галузі спінкалоритроніки, виконані на кафедрі фізики низьких температур Харківського національного університету. Розглянуто нові напрямки у магнітоелектроніці — спінтроніка, спінкалоритроніка та магноніка, які виникли із метою зменшення дисипації у звичайній напівпровідниковій мікроелектроніці. Розроблені теоретичні обґрунтування в роботі [118] є актуальним для експериментів зі спіновою накачкою при низьких температурах і термоелектричних приладів, у яких температура магнонів істотно вища за фононну.

У *другому розділі* дисертації описується об'єкт та методи дослідження переносу тепла в гетерогенних наноструктурах. Наноматеріали — це не просто ще один крок у мініатюризації матеріалів або частинок. Нанорозмірний теплообмін був і є популярною темою впродовж останніх двох десятиліть. Завдяки нещодавньому прогресу в синтезі наноматеріалів і виготовленні наноструктур, нанорозмірний теплообмін залишиться актуальним і в майбутньому, відіграючи важливу роль в інформаційних технологіях, технологіях перетворення енергії та біомедичній інженерії. Краще розуміння механізмів теплоперенесення у великому діапазоні має вирішальне значення для розробки таких матеріалів і пристроїв для досягнення кращих властивостей і продуктивності. Фононне рівняння переносу тепла Больцмана (BTE) — це метод, здатний моделювати перенесення фононів від балістичного до дифузійного режимів, і велика кількість досліджень була зроблена для розробки чисельних розрахунків для цього рівняння. Однак, через обмежену обчислювальну ефективність існуючих методів, фононне рівняння переносу Больцмана стикається з

труднощами при застосуванні до складних задач, що залежать від моди, великими просторовими розмірами і великою температурною нерівновагою.

У *третьому розділі* представлено результати роботи. В першу чергу представлено кінетичний підхід, в рамках якого розглянуто поперечне перенесення тепла через металевий шар, розташований між двома масивними діелектриками за низьких температур, коли електрони в металевому шарі термалізовані. Даний підхід аналізований на кінетичному рівнянні Больцмана для фононної функції розподілу з граничними умовами, що враховують відбиття та заломлення акустичних хвиль при їх проходженні через міжшарові інтерфейси. Обчислено ефективну поперечну теплопровідність даної шаруватої системи при довільному значенні товщини металевого шару. Знайдено товщини, при яких у теплопровідності проявляється розмірний ефект та його залежність від температури, що потрібно враховувати при створенні електронних пристроїв, елементи яких мають субмікронні розміри.

Поперечну ефективну теплопровідність розраховано в двотемпературному (2ТМ) наближенні, тобто в термінах електронної та фононної температур. Порівняння отриманих результатів показують, що відносно просте двотемпературне наближення коректно описує кінетику теплоперенесення в багат шаровій системі тільки у разі товстих металевих шарів, коли товщина шару значно більша за фонон-електронну довжину вільного пробігу. Для більш тонких металевих шарів двотемпературне наближення дає невірний вираз для ефективної поперечної теплопровідності шаруватої структури, бо при малих товщинах не можна коректно ввести ні фононну температуру, ні фононну теплопровідність.

У *четвертому розділі* розглянуто кінетичний підхід переносу тепла фононами та магнонами через шар феромагнітного ізолятора, розташованого між двома масивними ізоляторами при низьких температурах, коли магнони в шарі феромагнітного ізолятора термалізовані внаслідок магнон-магнонних зіткнень і мають температуру магнонів. Розраховано ефективну поперечну теплопровідність даної шаруватої системи з довільною товщиною шару

ферромагнітного ізолятора, де тепловий потік переносять як магнони, так і фонони, та знайдено товщину, та знайдено товщину, при якій розмірний ефект проявляється в теплопровідності. Зауважено, що при зростанні значень  $l_{pm}$  і  $d_{cr}$  зі зниженням температури термостата, роль розмірного ефекту в поперечній теплопровідності шаруватих структур зростає зі зниженням температури. Порівняння результатів отриманих у роботі показують, що відносно просте двотемпературне наближення коректно описує кінетику теплообміну в багат шаровій системі лише у випадку товстих шарів ферромагнітного ізолятора, у яких товщина шару значно більша за вільний пробіг фонон-магنونів. Для більш тонких шарів ферромагнітного ізолятора двотемпературне наближення дає лише якісно правильний результат для ефективною поперечною теплопровідності шаруватою структурі.

*П'ятий розділ.* На основі мікроскопічної моделі розглянуто перенесення тепла в системі металевих шарів, розділених діелектричними прошарками при низьких температурах, коли електрони в металі термалізовані, а фонони – ні. Отримано аналітичний вираз для ефективною теплопровідності структур з довільною кількістю шарів, а також для надграток. Проаналізовано розмірний ефект теплопровідності і показано, що фононна механіка теплопровідності суттєво відрізняється для випадків товстих і тонких металевих шарів (у порівнянні з вільною довжиною фононів у металах). Отримані в роботі результати дають пояснення особливостей перенесення тепла в наноструктурах і є важливими для розробки наноструктурованих матеріалів для застосувань в області термоелектрики, спінової калоритроніки, плазмоніки та інших галузях.

***Головні наукові результати отримані у роботі, є наступними.***

1. Аналітично отримано рівняння для поперечного перенесення потоку тепла через металевий шар, розташований між двома масивними діелектриками.

2. Обчислено ефективну поперечну теплопровідність шаруватої системи діелектрик-метал-діелектрик при довільному значенні товщини металевого шару.

3. Знайдено товщини, металевого шару, при яких в теплопровідності проявляється розмірний ефект.

4. На основі мікроскопічної теорії знайдену ефективну поперечну теплопровідність для гетероструктури діелектрик-метал-діелектрик, порівняно з ефективною поперечною теплопровідністю, отриманою у рамках напівфеноменологічної двотемпературної моделі, тобто в термінах електронної та фононної температур і з'ясовано, що умови, при яких двотемпературний підхід, що часто використовується, не може бути застосований.

5. Мікроскопічну теорію переносу енергії в багат шарових наноструктурах поширено на структури, що містять шар феромагнітного ізолятора.

6. Розраховано у двотемпературному наближенні ефективну теплопровідність перпендикулярну до шарів, тобто через магنونну та фононну температури.

7. Знайдено товщину, феромагнітного ізолятора, при якій розмірний ефект проявляється в теплопровідності.

8. Розглянуто перенесення тепла в системі металевих шарів, розділених діелектричним прошарком при низьких температурах.

9. Розраховано поперечну теплопровідність в системі металевих шарів, розділених діелектричними прошарками.

10. Обчислено ефективну поперечну теплопровідність з довільною кількістю шарів, та проаналізовано розмірний ефект теплопровідності для випадків тонких і товстих шарів металу.

**Ключові слова:** гетероструктури, стаціонарне нагрівання, фононний теплообмін, низькі температури, спінтроніка, спінкалоритроніка, магنونіка,

магнон, фонон, спін-ізолятор, нанотрубка, термодинамічний потенціал,  
напівметали, напівпровідність, магнітне середовище, оператор спіну.