

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2016.40.9.621>

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

실험적 포논 평균자유행로 스펙트럼 분포를 이용한 포논 스펙트럼 포논-표면 산란율 모델

진 재 식^{*†}

* 조선이공대학교 기계설계과

Direct Determination of Spectral Phonon-Surface Scattering Rate from Experimental Data on Spectral Phonon Mean Free Path Distribution

Jae Sik Jin^{*†}

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

(Received May 30, 2016 ; Revised June 14, 2016 ; Accepted June 15, 2016)

Key Words: Phonon-Surface Scattering(포논-표면 산란), Phonon Mean Free Path(포논 평균자유행로), Thermal Conductivity(열전도율), Si-Ge Nanowire(실리콘-게르마늄 나노선)

초록: 본 연구에서는 실험적 데이터를 근간으로 박막재료의 스펙트럼(spectrum) 분포 별 포논-표면 산란율을 직접 계산할 수 있는 모델을 제시했다. 실험 측정결과인 포논 평균자유행로(mean free path, MFP) 스펙트럼 분포 별 열전달 기여도로부터 스펙트럼 의존적 포논-표면 산란율을 직접 도출하는 모델을 개발했고, 이 모델을 아직 실험적 방법으로 포논-표면 산란율을 측정하지 못한 Si_{0.9}-Ge_{0.1} 나노선(Nanowire, NW)에 적용하여, Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 내 포논 MFP 스펙트럼 분포를 구하고, 주파수에 따른 포논 전달특성을 살폈다. 이를 바탕으로 Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 단위길이당 포논-표면 산란율을 제시하여, 가로갈래 포논 주파수 의존성을 살폈다. 본 연구에서 제시한 모델은 향후 나노재료의 공학적 응용을 위한 나노구조물 열전달 해석모델 개발 및 나노재료 열전달 특성 조정(tailoring)을 위한 나노재료 최적설계에 활용될 수 있다.

Abstract: In this study, we present a model that can be used to calculate the phonon-surface scattering rate directly from the experimental data on phonon mean free path (MFP) spectra of nanostructures. Using this model and the recently reported length-dependent thermal conductivity measurements on Si_{0.9}Ge_{0.1} nanowires (NWs), we investigate the spectral reduced MFP distribution and the spectral phonon-surface scattering rate in the Si_{0.9}Ge_{0.1} NWs. From the results, it is found that the phonon transport properties with the material and the phonon frequency dependency of the spectral phonon-surface scattering rate per unit length of the NW. The model presented in this study can be used for developing heat transfer analysis models of nanomaterials, and for determining the optimum design for tailoring the heat transfer characteristics of nanomaterials for future applications of phonon nanoengineering.

- 기호설명 -

C : 비열 (J/m³K)
 K : 열전도율 (W/mK)
 k : 파수 (1/m)
 L : 나노선 길이 (μ m)
 L_{film} : 나노재료 특성길이 (m)
 r : 불순물 원자 반지름 (m)

S : Seebeck 계수 (V/K)
 T : 온도 (K)
 v_g : 포논 군속도 (m/s)

그리스문자

α : 조정 상수
 β : 열전도율 기여도
 γ : 산란율 (s⁻¹)
 η : 불순물 농도 (cm⁻³)
 κ : 열전도율 (W/mK)
 Λ : 평균자유행로 (m)

† Corresponding Author, jinjs@cst.ac.kr

© 2016 The Korean Society of Mechanical Engineers

σ	: 전기전도율 (S/m)
σ_i	: i 번째 포논 밴드의 산란 단면적 (m^2)
τ	: 이완시간 (s)
ω	: 진동수 (1/s)

하첨자

a	: 음향 포논
acc	: 누적 량
bulk	: 벌크(bulk)
e	: 전기
film	: 박막
i	: i 번째 포논 밴드 또는 포논 모드
ij	: i 와 j 번째 포논 밴드에 의한 물성 값
imp	: 불순물
o	: 광 포논
red	: 축소 값
s	: 포논-표면
ph	: 포논

1. 서 론

포논(phonon)은 반도체 및 절연체(dielectric) 내의 결정체(crystal) 격자(lattice)의 열을 전달하는 양자화된 진동인데,^(1,2) 포논 전달특성 연구는 고효율의 나노시스템 개발에 있어서 매우 중요하다.⁽¹⁻⁴⁾ 특히, 최근 나노제작기술(nano-fabrication technology)의 발달에 힘입어 시스템 특성길이가수에서 수십 nm에 이르는 점(dot), 선(wire), 박막(thin film) 등 다양한 형태의 나노재료의 제작이 가능해졌다.⁽⁴⁾

시스템 크기가 포논의 평균자유행로(mean free path, MFP)와 비슷하거나 작아지면, 크기효과(size effect)에 의한 포논-표면 산란(phonon-surface scattering)이 주요 포논 산란 메커니즘이 되며, 발리스틱(ballistic) 포논 전달 현상이 수반된다.^(1,2) 나노제작기술 응용분야의 하나로, 폐열(waste heat)을 활용하여 전기를 생산할 수 있는 열전(thermoelectrics) 소자가 있다.⁽¹⁻⁴⁾ 열전 소자의 효율을 의미하는 열전성능지수(thermoelectric figure of merit, ZT)는 $ZT = \sigma S^2 T / (K_{ph} + K_e)$ 로 정의되며, 전자의 열전도율(K_e)은 전기전도율(σ)에 비례하므로, ZT 향상은 일반적으로 포논의 열전도율(K_{ph}) 축소에 의지한다.^(1,4) 따라서 열전 소자의 효율 향상을 위하여, 큰 전기 전도율을 갖는 동시에 낮은 열전도율을 가지는 재료 개발 연구가 활발히 진행되고 있다.⁽³⁻²²⁾ 이런 노력의 일환으로 나노선(nanowire, NW)를 활용한 열전도율 감소 방법이 보고됐고,⁽⁴⁻²²⁾ NW의 열전도율을 낮추기 위한 다양한 시도들이 참고문헌⁽⁵⁾에 정리되어 있다. 특히, 실리

콘-게르마늄 나노선(Si-Ge NW)과 같은 합금(alloy) NW는 재료 내 포논-불순물(impurity) 산란이 추가되므로 열전도율이 매우 낮아져, 열전 소자의 효율을 더욱 향상시킨다.⁽¹⁹⁻²²⁾

포논-표면 산란은 표면 거칠기(roughness)와 상관길이(correlation length) 같은 재료의 표면상태 및 포논의 주파수 스펙트럼(spectrum)에 크게 의존하며,⁽⁶⁻²²⁾ 나노구조물의 포논-표면 산란 현상의 이해는 공학적 응용 목적의 나노구조물 열전달 해석 및 나노재료 열전달 특성 조정을 위해 매우 중요하다.^(1,4) 지금까지 나노재료의 포논-표면 산란에 대한 이론적 연구는 많이 발표됐으나,^(10,13-15,17) 실험적 연구는 측정기술의 한계로 인해, Si NW⁽¹¹⁾와 Si 나노시트(nanosheet)⁽¹²⁾ 정도의 재료에 대한 포논-표면 산란율이 측정됐다.

본 연구의 목적은 박막재료의 MFP 스펙트럼 분포 별 열전달 기여도 실험적 측정 결과로부터 스펙트럼 분포 별 포논-표면 산란율을 직접 도출하는 방법을 제시하는 것인데, 이 방법을 적용하기 위해서는 (1) 벌크(bulk) 재료의 포논 MFP 스펙트럼 별 열전도율 분포; (2) 박막 재료의 두께 별 포논 MFP 스펙트럼 별 열전도율 분포; (3) 포논의 스펙트럼 특성인 분산관계(dispersion relation)를 고려한 열전도율 예측 모델이 필요하다.

앞서 언급한 바와 같이 Si-Ge NW에 대한 포논-표면 산란의 이해가 중요한데, 아직 실험적 방법으로 측정된 정확한 정보가 없다. 반면에, Si-Ge NW의 포논-표면 산란에 대한 이론적 연구로는 Beckmann-Kirchhoff 산란 이론을 이용하여, Si-Ge NW의 표면 거칠기 및 상관길이 변화에 따른 포논-표면 산란의 열전달 영향을 Si-Ge NW 직경(diameter)에 따라 해석한 결과가 보고된 바 있다.⁽²⁰⁾ 한편, 최근까지도 포논-표면 산란율(γ)을 계산하는 방법은 $\gamma = v_g / L_{\text{film}}$ (여기서, v_g : 포논 군속도(group velocity), L_{film} : 나노재료의 특성길이)로 단순 계산하여, 볼츠만 수송 방정식(Boltzmann transport equation)과 같은 열전달 모델에 적용하여 해석하는 경우가 많다.^(21,24,25)

최근에 Si-Ge NW의 길이 변화에 따른 열전도율 측정 실험결과⁽¹⁹⁾로부터 Si-Ge NW의 포논 MFP 스펙트럼 분포 별 열전도율 기여도를 구한 결과가 보고됐다.⁽²³⁾ 이를 이용하여, 본 연구에서 제시한 방법을 Si-Ge NW에 적용한다. NW의 열전도율은 NW의 길이에 비례함이 잘 알려져 있어,⁽²¹⁾ 본 연구에서는 Si-Ge NW의 “단위길이당” 스펙트럼 분포 별 포논-표면 산란율을 제시하고, 포논-표면 산

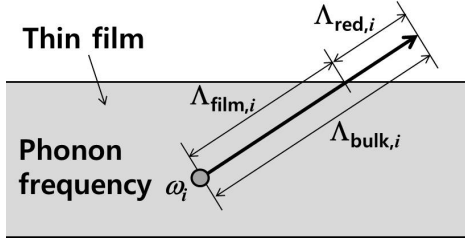


Fig. 1 Schematic diagram of the thin film and phonon-surface scattering in terms of a mean free path (MFP). Λ_{bulk} is the phonon MFP within a bulk material, Λ_{film} is the phonon MFP of the thin film, Λ_{red} is the reduced phonon MFP by the phonon-surface scattering

란 특성을 분석했다. 포논 분산관계를 고려하기 위한 모델로는 Narumanchi 등^(24,25)이 제안한 full phonon dispersion (FPD) 모델 개념을 도입했는데, 이 개념은 최근에 실리콘 박막 소자 내 포논 MFP 스펙트럼 분포 별 열전달 특성 연구에 적용된바 있다.⁽²⁶⁾

2. 박막 스펙트럼 포논-표면 산란율 모델

포논의 i 모드⁽¹⁹⁾에 대한 MFP (Λ_i)는 포논의 이완 시간(relaxation time, τ_i)과 군속도($v_{g,i}$)를 이용하여 $\Lambda_i = \tau_i \cdot v_{g,i}$ 로 표현되며, 산란율(γ_i)은 $\gamma_i = 1/\tau_i$ 이다.⁽¹⁾ 따라서 포논의 i 모드에 대한 γ_i 과 Λ_i 와 관계는 다음과 같다.

$$\gamma_i = \frac{v_{g,i}}{\Lambda_i}. \quad (1)$$

Fig. 1에 박막 내 i 모드 포논의 주파수 ω_i 에 대한 벌크 상태의 MFP($\Lambda_{\text{bulk},i}$), 박막의 MFP($\Lambda_{\text{film},i}$), 포논-표면 산란에 의해 줄어든(reduced) MFP($\Lambda_{\text{red},i}$)를 나타냈다.

박막 내 포논 산란의 종류는 포논-표면 산란, 서로 다른 모드의 포논들 사이의 산란, 포논-불순물 산란 등이 있는데,^(1,2) 포논-표면 산란을 제외한 다른 종류의 포논 산란들은 벌크 상태에서도 발생한다. 이들 포논 산란들이 서로 영향을 주지 않는다고 가정한 Matthiessen's rule⁽¹⁻⁴⁾을 적용하면, i 모드 포논에 대한 포논-표면 산란율($\gamma_{s,i}$)은 $\gamma_{s,i} = \gamma_{\text{film},i} - \gamma_{\text{bulk},i}$ 로 표현할 수 있다. 여기서 $\gamma_{\text{film},i}$ 와 $\gamma_{\text{bulk},i}$ 는 식 (1)을 이용하면 다음과 같다.

$$\gamma_{\text{film},i} = \frac{v_{g,i}}{\Lambda_{\text{film},i}}, \quad \gamma_{\text{bulk},i} = \frac{v_{g,i}}{\Lambda_{\text{bulk},i}}. \quad (2)$$

결국 $\gamma_{s,i}$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$\gamma_{s,i} = v_{g,i} \frac{\Lambda_{\text{red},i}}{\Lambda_{\text{film},i} \Lambda_{\text{bulk},i}}, \quad (3)$$

여기서 $\Lambda_{\text{red},i} = \Lambda_{\text{bulk},i} - \Lambda_{\text{film},i}$ 이다.

포논의 분산관계를 고려한다면, 운동이론(kinetic theory)으로부터 다음의 관계식을 얻는다.⁽²⁷⁾

$$\Lambda_{\text{bulk},i} = \frac{3K_{\text{bulk},i}}{C_i v_{g,i}}. \quad (4)$$

재료의 포논 분산관계의 크기효과는 박막의 경우는 10 nm 정도 크기 이하에서,⁽²⁸⁾ NW의 경우는 수 nm 정도 크기에서 발생하므로,⁽¹⁶⁾ 시스템 특성 길이가 10 nm 이상에 대해 다음과 같이 가정할 수 있다.

$$\Lambda_{\text{film},i} = \frac{3\beta_i K_{\text{film},i}}{C_i v_{g,i}}, \quad (5)$$

여기서 β_i 는 포논 스펙트럼 별 열전도율 기여도를 의미하는데, 참고문헌⁽²⁹⁾의 온도 300 K 실리콘 재료에 대한 포논 스펙트럼 별 열전도율 기여도 해석 결과를 참고하면, 포논 스펙트럼 별 열전도율 기여도 특성이 박막 두께 직각방향(cross-plane)에 대해서는 벌크 재료와 완전히 다르지만, 박막 두께 평행방향(in-plane)에 대해서는 벌크 재료와 상당히 유사함을 알 수 있다. 따라서 박막 특성길이 변화에 따른 열전도율 변화가 K_{film} 에 포함됨을 고려하면, 박막 두께 직각방향의 포논 전달이 매우 주도적인 극히 얇은 박막의 두께 수직방향 포논 전달 문제가 아닌 경우, 식 (5)에서처럼 박막 재료에 대한 β_i 를 벌크 재료와 같다고 가정할 수 있다. 결국, 반도체 및 절연체 박막 재료에서 실험근간의 포논 스펙트럼 별 포논-표면 산란율($\gamma_{s,i}$)은 식 (4)와 식 (5)로부터 포논 스펙트럼 별 $\Lambda_{\text{bulk},i}$ 및 $\Lambda_{\text{film},i}$ 를 도출하여, 식 (3)에 대입하여 구할 수 있다.

3. Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 단위길이당 포논-표면 산란율

3.1 Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 내 포논 전달 물성치

첫 번째로, 포논 분산관계에서 i 번째 밴드의 군속도 $v_{g,i}$ 와 비열 C_i 에 대한 정보가 필요하다. 또한, i 번째 밴드의 포논과 불순물과의 산란율(γ_{ii})과 포논-포논 산란율을 의미하는 i 번째 밴드 포논과 다른 포논 모드인 j 번째 밴드 포논 산란율(γ_{ij})에 대한 정보도 필요하다. 본 연구에서 군속도와 비열

계산에서 10%의 게르마늄 성분의 영향은 무시했다. 즉, 300 K에서 Si [001]방향의 분산관계⁽³⁰⁾를 이용하여 군속도($v_{g,i}$)는 $v_{g,i} = \partial\omega_i / \partial k_i$ 로 계산했다.⁽¹⁾ 포논의 비열 (음향갈래: C_i ; 광갈래: C_o) 온도 변화에 대한 포논 에너지 변화율로 계산되는데,^(1,2,24) 참고문헌⁽²⁶⁾에 각 밴드에 대한 포논 비열 값이 나와있다. γ_{ii} 및 γ_{ij} 를 계산하기 위한 포논 이완시간 τ_{ij} 와 τ_{ii} 는 섭동이론(perturbation theory)으로 계산되는데, Narumanchi 등⁽²⁵⁾이 사용한 값을 이용했다. i 번째 밴드 포논 모드와 Ge의 10% 불순물에 의한 산란율($\gamma_{imp,i}$)은 $\gamma_{imp,i} = \alpha\sigma_i\eta v_{g,i}$ 로 계산했는데,^(24,31) 여기서 상수 $\alpha=50$ 을 사용했고,⁽²⁴⁾ 산란 단면적(scattering cross section)인 σ_i 는 다음 식으로 구했다.⁽³¹⁾

$$\sigma_i = \pi r^2 \left[\frac{(rk_i)^4}{(rk_i)^4 + 1} \right] \quad (6)$$

여기서 r 는 Ge의 원자 반지름이며, k_i 는 i 번째 밴드 포논 모드의 파수(wavenumber)이다. 포논-표면 산란의 반사(reflection) 정도는 정반사(specular)와 난반사(diffuse) 사이의 값으로 표현되는데, 일반적으로 300 K 온도 영역에서는 난반사로 가정할 수 있고,⁽³⁴⁾ 또한, 이 온도 영역에서 포논과 동위원소(isotope) 및 격자 내 점결함(point defect)과의 산란은 무시할 수 있다.⁽³²⁾

3.2 Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 스펙트럼 포논-표면 산란율

최근에 직경 100 nm인 Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW의 길이 변화 ($L = 1.23 \sim 11.4 \mu\text{m}$)에 따른 열전도율 실험 측정 결과⁽¹⁹⁾를 이용하여, 재구성 방법(reconstruction method)^(33,34)으로 Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW의 포논MFP 스펙트럼 분포 별 누적 열전도율($K_{acc,i}$)을 제시했다.⁽²³⁾ 우선 β_i 를 구하기 위해, 참고문헌⁽²³⁾의 $K_{acc,i}$ 로부터 포논MFP 스펙트럼 분포 별 열전도율 기여도를 도출하여 Fig. 2에 나타냈다.

Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW 내 포논에 의한 에너지 전달을 정확히 해석하기 위해서는 포논 분산관계를 고려해야 하는데,^(24,25) 본 연구에서는 Ge의 10% 성분이 Si 분산관계에 미치는 영향은 무시하고, 300 K에서 실리콘의 [001] 방향에 대한 포논 분산관계⁽³⁰⁾를 고려했고, 포논 분산관계의 격자 방향은 등방성(isotropic)을 갖는다고 가정했다.^(24,25,35) 포논 분산관계를 고려하기 위해 FPD 모델^(24,25) 개념을 적용했는데, FPD 모델 개념에 대한 간략한 서술은 다음과 같다. 포논 분산관계의 종방향(longitudinal)

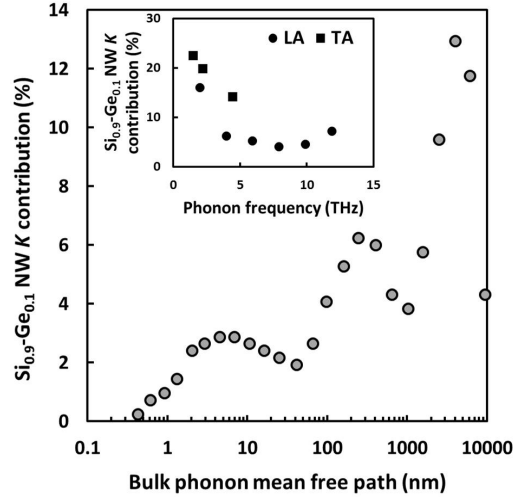


Fig. 2 Contribution to the phonon thermal conductivity vs bulk phonon mean free path for Si_{0.9}-Ge_{0.1} nanowire in 100 nm diameter at a temperature of 300 K. Inset presents Si_{0.9}-Ge_{0.1} NW phonon thermal conductivity contribution (β_i) as a function of phonon frequency

음향 갈래(acoustic branch) 포논(LA)과 횡방향(transvers) 음향 갈래 포논(TA)의 각 갈래의 전체 진동수 범위를 균등 분할하여, LA와 TA 포논에 대해 각각 6 밴드(band)로 구분하여, 각 밴드 내에서는 선형적인 분산관계를 가지고 동일한 에너지 전달특성(군속도 및 비열)을 갖는다고 (즉, 각 밴드는 Gray 스펙트럼 특성을 갖는다고) 가정했고, 광 갈래(optical branch)는 해당 진동수 범위(~ 2 THz)가 LA 포논 진동수 범위 (~ 12 THz)에 비해 매우 작으므로 단일 밴드로 처리했다. 이에 대한 상세한 설명은 Narumanchi 등^(24,25)에 언급되어 있다. Fig. 2에 나타낸 포논 MFP 스펙트럼 분포 별 열전도율 기여도를 이용하여, i 모드 포논에 해당하는 β_i 값을 정해야 하는데, 포논 밴드 스펙트럼 범위의 평균값에 해당하는 MFP ($\Lambda_i = \tau_i v_{g,i}$)를 Fig. 2에서 찾고, 그 MFP에 해당하는 β_i 값을 찾아서 Fig. 2에 삽도(inset)했다. 여기서 TA 포논 모드 중에서 4.64 THz 미만인 포논 모드 (TA의 1번째 밴드^(24,25))와 약 13.9 ~ 23.2 THz 영역의 포논 모드 (TA의 4~5번째 밴드^(24,25))는 LA 포논 모드와 중첩이 되어, 서로 구별하는 것이 거의 불가능한데, 길이가 $5 \mu\text{m}$ 인 Si-Ge NW 내에서 10 THz 이하의 포논 모드의 열전달 기여도가 35% 정도임이 이론적 연구⁽²¹⁾로 보고 됐으나, 이 열전달 기여도는 Si-Ge NW의 길이 및 표면상태 의존성이 크고,⁽²³⁾ 특히, 일반적으로 합금 나노구조물에서 LA 포논 모드의 열전도 기여도가 주도적이므로,⁽²⁵⁾ 상기 TA 1 및

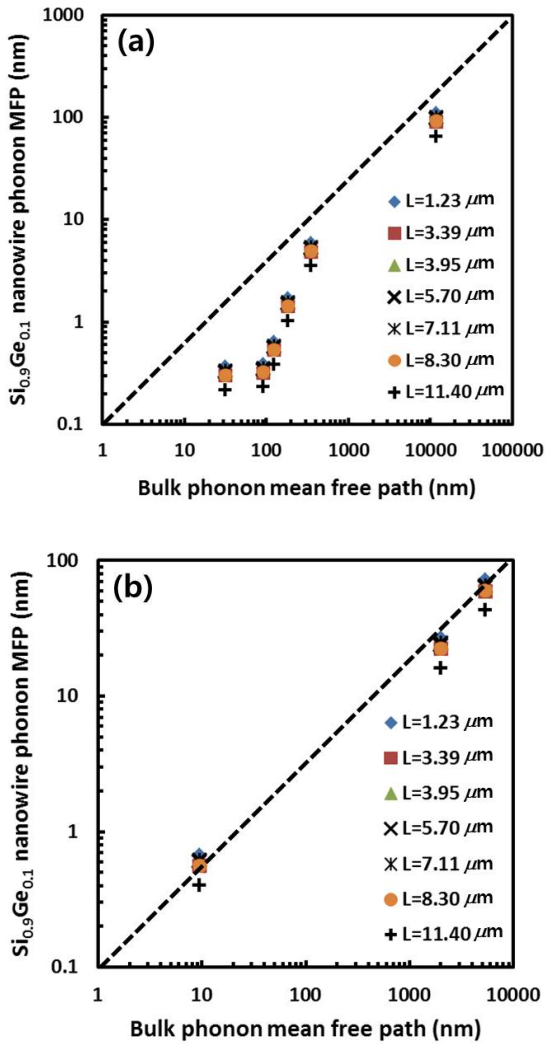


Fig. 3 Phonon mean free path vs bulk phonon mean free path for $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ nanowire in 100 nm diameter in terms of length-dependency at a temperature of 300 K. (a) Longitudinal phonon branch; (b) Transverse phonon branch

TA 4와 5 밴드 포논 모드의 열전달 기여도를 무시했다. 이렇게 결정된 β 값과 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW의 포논 전달 물성치를 식 (5)에 대입한 결과인 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW 내 포논 MFP를 벌크 상태에서의 포논 MFP에 대비하여 Fig. 3에 나타냈다. LA 및 TA 갈래 포논 모드들 모두 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW 내에서 MFP가 100 배 정도 작아짐을 확인할 수 있고, LA 갈래 포논 모드의 경우, MFP가 30~200 nm 범위의 포논들의 MFP 축소가 상대적으로 크게 나타나, $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW 내에서 약 40 THz 이상의 LA갈래 포논 모드들의 산란이 큼을 알 수 있다. 특히, $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW의 길이 변화 ($L=1.23\sim 11.4\ \mu\text{m}$) 범위에 대하여, NW의 길이가 길어질수록 벌크 MFP 축소가 커지는데, 그 양은 전반적으로 40% 였다.

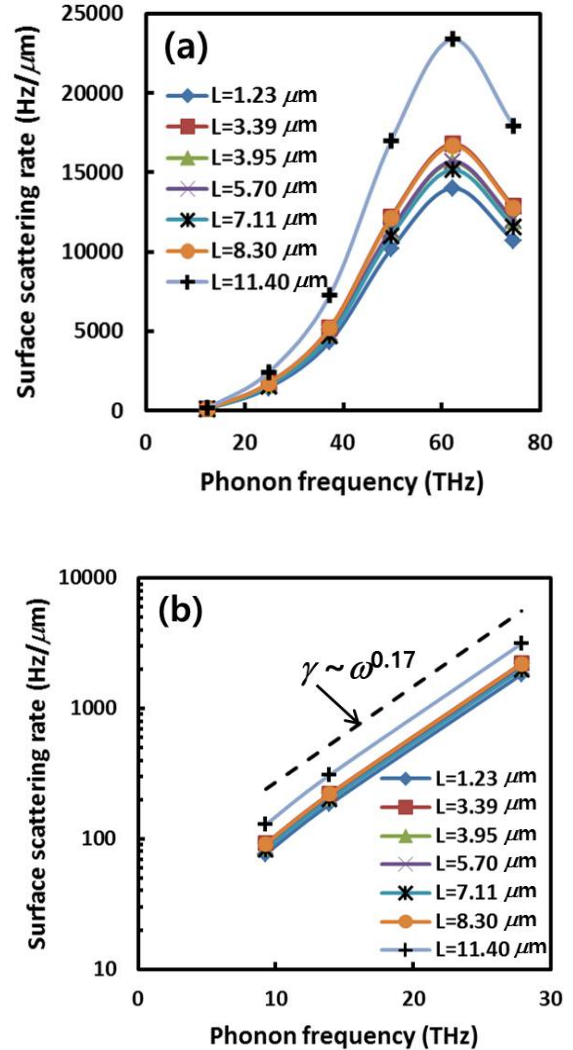


Fig. 4 Phonon-surface scattering rate vs phonon frequency for $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ nanowire in 100 nm diameter in terms of length-dependency at a temperature of 300 K. (a) Longitudinal phonon branch; (b) Transverse phonon branch

Fig. 3의 결과를 이용하여, $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW에 대한 단위길이당 스펙트럼 포논-표면 산란율을 계산하여, Fig. 4에 나타냈다. 본 결과를 직접 비교하기 위한 적합한 조건의 이론결과 및 실험결과는 없지만, LA 및 TA 갈래 포논에 대하여, 전체 주파수 범위에서 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW길이(L)가 증가할수록 포논-표면 산란율이 증가함을 알 수 있고, $L=11.40\ \mu\text{m}$ 에서 상대적으로 크며, $L=8.30\ \mu\text{m}$ 미만에서는 길이 의존성이 그다지 크지 않음을 알 수 있다. 특히, TA 갈래 포논 모드의 경우, 단위길이당 포논-표면 산란율이 포논 주파수(ω)에 $\omega^{0.17}$ 비례함을 알 수 있는데, 벌크 Si의 경우, 상온 범위에서 포논의 Normal 과정은 ω^2 , Umklapp 과정은 ω^3 에 비례함이 보고 됐다.⁽³⁶⁾ 이와 비교하면, $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW

의 TA 갈래 포논의 주파수 의존도가 벌크 Si에 비하여 상대적으로 작음을 알 수 있다.

4. 결론

지금까지 박막재료의 포논-표면 산란율(γ)에 대한 이론적 연구는 포논의 군속도(v_g)와 나노재료의 특성길이(L_{film})의 비로 계산됐는데(즉, $\gamma = v_g / L_{\text{film}}$), 본 연구에서는 박막재료의 MFP 스펙트럼 분포 별 열전달 기여도 실험적 측정 결과로부터 스펙트럼 분포 별 포논-표면 산란율을 직접 도출하는 방법을 제시했다. 또한, 이 방법을 아직 실험적 방법으로 포논-표면 산란율을 측정할 수 없는 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW에 대해 적용하여, $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW 내 포논 MFP 스펙트럼 분포를 구하고, 주파수에 따른 포논 전달특성을 살폈다. 이를 바탕으로 $\text{Si}_{0.9}\text{-Ge}_{0.1}$ NW 단위길이당 포논-표면 산란율을 제시하여, NW 내 포논 주파수 의존성을 살폈다. 본 연구결과는 향후 나노재료의 공학적 응용을 위한 나노구조물 열전달 해석모델 개발 및 나노재료 열전달 특성 조정(tailoring)을 위한 최적설계에 활용될 수 있다.

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) Zhang, Z. M., 2007, *Nano/Microscale Heat Transfer*, Mc Graw Hill, New York, pp. 162~182.
- (3) Kim, W., Zide, J., Gossard, A., Klenov, D., Stemmer, S., Shakouri, A. and Majumdar, A., 2006, "Thermal Conductivity Reduction and Thermoelectric Figure of Merit Increase by Embedding Nanoparticles in Crystalline Semiconductors," *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 4, Paper Number 045901.
- (4) Kim, W., 2015, "Strategies for Engineering Phonon Transport in Thermoelectrics," *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 3, No. 10, pp. 10336~10348.
- (5) Park, H. J., Nah, J. H., Tutuc, E. and Seol, J. H., 2015, "Thermal Conductivity Measurement of $\text{Ge-Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Core-Shell Nanowires Using Suspended Microdevices," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 39, No. 10, pp. 825~829.
- (6) Li, D., Wu, Y., Kim, P., Shi, L., Yang, P. and Majumdar, A., 2003, "Thermal Conductivity of Individual Silicon Nanowires," *Applied Physics Letters*, Vol. 83, No. 14, pp. 2934~2936.
- (7) Hochbaum, A. I., Chen, R., Delgado, R. D., Liang,

- W., Garnett, E. C., Najarian, M., Majumdar, A. and Yang, P., 2008, "Enhanced Thermoelectric Performance of Rough Silicon Nanowires," *Nature*, Vol. 451, No. 7175, pp. 163~167.
- (8) Zou, J. and Balandin, A., 2001, "Phonon Heat Conduction in a Semiconductor Nanowire," *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, No. 5, pp. 2932~2938.
- (9) Lim, J., Hippalgaonkar, K., Andrews, S. C., Majumdar, A. and Yang, P., 2012, "Quantifying Surface Roughness Effects on Phonon Transport in Silicon Nanowires," *Nano Letters*, Vol. 12, No. 5, pp. 2475~2482.
- (10) Chen, R., Hochbaum, A. I., Murphy, P., Moore, J., Yang, P. and Majumdar, A., 2008, "Thermal Conductance of Thin Silicon Nanowires," *Physical Review Letters*, Vol. 101, No. 10, Paper Number 105501.
- (11) Ghossoub, M. G., Valavala, K. V., Seong, M., Azeredo, B., Hsu, K., Sadhu, J. S., Singh, P. K. and Sinha, S., 2013, "Spectral Phonon Scattering from Sub-10 nm Surface Roughness Wavelengths in Metal-Assisted Chemically Etched Si Nanowires," *Nano Letters*, Vol. 13, No. 4, pp. 1564~1571.
- (12) Hertzberg, J. B., Aksit, M., Otelaja, O. O., Stewart, D. A. and Robinson, R. D., 2014, "Direct Measurements of Surface Scattering in Si Nanosheets Using a Microscale Phonon Spectrometer: Implications for Casimir-Limit Predicted by Ziman Theory," *Nano Letters*, Vol. 14, No. 2, pp. 409~415.
- (13) Zhou, Y., Chen, Y. and Hu, M., 2016, "Strong Surface Orientation Dependent Thermal Transport in Si Nanowires," *Scientific Report*, Vol. 6, Paper Number 24903.
- (14) Zianni, X. and Chantrenne, P., 2013, "Thermal Conductivity of Diameter-Modulated Silicon Nanowires Within a Frequency-Dependent Model for Phonon Boundary Scattering," *Journal of Electronic Materials*, Vol. 42, No. 7, pp. 1509~1513.
- (15) Xie, G., Guo, Y., Li, B., Yang, L., Zhang, K., Tang, M. and Zhang, G., 2013, "Phonon Surface Scattering Controlled Length Dependence of Thermal Conductivity of Silicon Nanowires," *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 15, No. 35, pp. 14647~14652.
- (16) Marchbanks, C. and Wu, Z., 2015, "Reduction of Heat Capacity and Phonon Group Velocity in Silicon Nanowires," *Journal of Applied Physics*, Vol. 117, No. 8, Paper Number 084305.
- (17) Sadhu, J. and Sinha, S., 2011, "Room-temperature Phonon Boundary Scattering Below the Casimir Limit," *Physical Review B*, Vol. 84, No. 11, Paper Number 115450.
- (18) Feser, J. P., Sadhu, J. S., Azeredo, B. P., Hsu, K. H., Ma, J., Kim, J., Seong, M., Fang, N. X., Li, X., Ferreira, P. M., Sinha, S. and Cahill, D. G., 2012,

- “Thermal Conductivity of Silicon Nanowire Arrays with Controlled Roughness,” *Journal of Applied Physics*, Vol. 112, No. 11, Paper Number 114306.
- (19) Hsiao, T.-K., Chang, H.-K., Liou, S.-C., Chu, M.-W., Lee, S.-C. and Chang, C.-W., 2013, “Observation of Room Temperature Ballistic Thermal Conduction Persisting over 8.3 μm in SiGe Nanowires,” *Nature Nanotechnology*, Vol. 8, No. 7, pp. 534~538.
- (20) Malhotra, A. and Maldovan, M., 2016, “Impact of Phonon Surface Scattering on Thermal Energy Distribution of Si and SiGe Nanowires,” *Scientific Report*, Vol. 6, Paper Number 25818.
- (21) Xie, G., Guo, Y., Wei, X., Zhang, K., Sun, L., Zhong, J., Zhang, G. and Zhang, Y.-W., 2014, “Phonon Mean Free Path Spectrum and Thermal Conductivity for $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Nanowires,” *Applied Physics Letters*, Vol. 104, No. 23, Paper Number 233901.
- (22) Yin, L., Lee, E. K., Lee, J. W., Whang, D., Choi, B. L. and Yu, C., 2012, “The Influence of Phonon Scatterings on the Thermal Conductivity of SiGe Nanowires,” *Applied Physics Letters*, Vol. 101, No. 4, Paper Number 043114.
- (23) Zhang, H., Hua, C., Ding D. and Minnich, A. J., 2015, “Length Dependent Thermal Conductivity Measurements Yield Phonon Mean Free Path Spectra in Nanostructures,” *Scientific Report*, Vol. 5, Paper Number 9121.
- (24) 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.
- (25) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2005, “Comparison of Different Phonon Transport Models for Predicting Heat Conduction in Silicon-on-insulator Transistors,” *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 127, No. 7, pp. 713~723.
- (26) 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.
- (27) Lee, J., Lim, J. and Yang, P., 2015, “Ballistic Phonon Transport in Holey Silicon,” *Nano Letters*, Vol. 5, No. 5, pp. 3273~3279.
- (28) Minnich, A. J., 2015, “Thermal Phonon Boundary Scattering in Anisotropic Thin Films,” *Applied Physics Letters*, Vol. 107, No. 18, Paper Number 183106.
- (29) Sellan, D. P., Turney, J. E., McGaughey, A. J. H. and Amon, C. H., 2010, “Cross-plane Phonon Transport in Thin Films,” *Journal of Applied Physics*, Vol. 108, No. 11, Paper Number 113524.
- (30) Brockhouse, B. N., 1959, “Lattice Vibrations in Silicon and Germanium,” *Physical Review Letters*, Vol. 2, No. 6, pp. 256~258.
- (31) Majumdar, A., 1993, “Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films,” *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 115, No. 7, pp. 7~16.
- (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) 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.
- (34) 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.
- (35) 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.
- (36) Esfarjani, K. and Chen, G., 2011, “Heat Transport in Silicon from First-principles Calculations,” *Physical Review B*, Vol. 84, No. 8, Paper Number 085204.