

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМ. Н. Э. БАУМАНА»

На правах рукописи

Баринов Александр Алексеевич

Разработка статистических моделей взаимодействия фононов  
с шероховатыми границами наноструктур

Специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат  
диссертации на соискание учётной степени  
кандидата технических наук

Москва – 2022

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана).

Научный руководитель Хвесюк Владимир Иванович  
доктор технических наук, профессор

Официальные оппоненты Дмитриев Александр Сергеевич  
доктор технических наук, профессор, профессор  
кафедры низких температур Федерального  
государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования «Национальный  
исследовательский университет «МЭИ»

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение  
науки «Объединенный институт высоких температур  
Российской академии наук – ОИВТ РАН»

Защита состоится «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г. в \_\_\_ часов 00 минут на заседании  
диссертационного совета Д 212.141.08 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005,  
г. Москва, Лефортовская набережная, д. 1, ф-т «Энергомашиностроение» ауд. 202Э.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на  
сайте <http://www.bmstu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения,  
просьба направлять по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1,  
МГТУ им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.141.08.

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.141.08  
кандидат технических наук, доцент

\_\_\_\_\_ Егоров К.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы

На протяжении последнего десятилетия наблюдается бурное развитие технологий, построенных на использовании структур микро- и наномасштаба. К примеру, в микропроцессорной электронике характерный масштаб элементной базы – транзисторов – уже достиг 10-нм. Тенденция к уменьшению размеров компонентов приводит к падению теплопроводности и резкому росту удельного тепловыделения за счет так называемого размерного эффекта и увеличения рассеяния фононов на границах элементов. Так как работоспособность таких устройств сильно зависит от температуры, то возникает проблема обеспечения требуемого теплового режима. В связи с этим, актуальной является разработка надёжных методов расчёта переноса тепла в наноструктурах. При этом особо важное внимание следует уделить решению проблемы взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями, так как именно этот процесс играет *существенную либо определяющую роль* в эффективной теплопроводности, так как типичной для наноструктур является ситуация, когда частота взаимодействий фононов с поверхностями выше или значительно выше, чем частота фонон-фононных взаимодействий. Такой тип теплопереноса относят к баллистическому либо диффузионно-баллистическому режиму.

В основе рассмотрения процессов переноса тепла в полупроводниках и диэлектриках лежит кинетическая теория и статистика квазичастиц фононов – квантов колебаний решетки – с учетом размерного эффекта для учета влияния геометрии (размера образца) на перенос тепла. Как показывают последние экспериментальные данные по анализу свойств наноструктур [1], на эффективную теплопроводность оказывают влияние как среднеквадратичная шероховатость  $\sigma$  (высоты шероховатости), так и длина корреляции  $l$  (длины шероховатости). При этом их отношение – средний тангенс угла наклона профиля,  $\gamma = \sigma/l$  – может варьироваться в широком диапазоне от 0,01 до 0,7, т.е. от «гладкого» до существенно неоднородного профиля. При этом увеличение  $\sigma/l$  от 0,2 до 0,6 для нанонитей ведёт к уменьшению эффективной теплопроводности в 4 раза.

В существующих моделях влияние границ на теплоперенос учитывается через так называемый параметр зеркального отражения  $p$ , который равен доле  $p$  фононов, отраженных от поверхности зеркально, или диффузно,  $1-p$ . При этом учёт рассеяния на границах заменяется на приближенную модель Казимира-Займана-Соффера [2], основным результатом которой является формула, устанавливающая связь между параметром  $p$  и высотой шероховатости  $\sigma$ :  $p = \exp(-2\sigma^2 k^2 \cos^2 \theta)$ , где  $k$  – волновое число фонона с длиной волны  $\lambda$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ ;  $\theta$  – угол падения волны относительно нормали к средней линии поверхности. Важно подчеркнуть следующие слабые стороны данного подхода. Во-первых, это выражение применимо лишь для случая нулевой длины корреляции,  $l=0$ ; что ставит под сомнение его применение для анализа теплопереноса в наноструктурах. Во-вторых, граница образца моделируется

лишь высотами шероховатости, распределёнными по случайному закону Гаусса, без учета пространственной конфигурации шероховатостей. В-третьих, непосредственное взаимодействие фононов с шероховатостями не рассматривается, а задача заменяется на определение изменения амплитуды отраженной волны в зависимости от соотношения между длиной волны и высотой шероховатости. Существуют и другие модели, обладающие схожими недостатками, в связи с чем параметр  $p$  не удается однозначно связать со свойствами реальной шероховатой поверхности, поэтому, во-первых, на практике его используют для подгонки результатов расчета теплопроводности под экспериментальные данные. Во-вторых, это не позволяет применять данный подход для прогнозирования теплофизических свойств наноструктур, таких как эффективная теплопроводность. В-третьих, это не позволяет установить влияние параметров шероховатой границы, воздействуя на которые, можно было бы эффективно управлять тепловым режимом.

В связи с вышесказанным, представляет большую актуальность разработка теории теплопроводности наноструктур с учётом шероховатости их поверхностей.

**Целью работы** является разработка расчетно-теоретической модели теплопроводности изоляторов и полупроводниковых наноструктур на примере пленок кремния в продольном направлении и решение фундаментальной проблемы – строгий учет взаимодействия переносчиков тепла с шероховатыми границами твердых тел.

**Задачи работы.** Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Провести комплексный анализ процессов взаимодействия фононов с шероховатой границей образца; и выявить факторы, влияющие на процесс переноса тепла в баллистическом и диффузионно-баллистическом режимах.
2. Разработать модель взаимодействия фононов с шероховатой границей твердого тела. Провести расчета длины свободного пробега фононов в результате рассеяния на шероховатой границе в баллистическом режиме теплопереноса.
3. Разработать модель расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом размерного эффекта, анизотропии переноса тепла и шероховатости границ наноструктур.
4. Создать программу для расчета эффективной теплопроводности пленок согласно разработанной модели.
5. Провести расчет эффективной теплопроводности пленок кремния в широком диапазоне толщин, температур и шероховатостей поверхности образца для валидации и верификации предложенного метода расчета.

#### **Научная новизна работы**

1. Впервые разработана и применена статистическая модель расчёта взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями твёрдых тел, основанная на применении приближения Кирхгофа – рассмотрении касательных плоскостей, от

которых происходит отражение фононов при взаимодействии с каждой точкой шероховатой поверхности и определении углов отражения от такой поверхности.

2. Впервые развит метод расчёта длин свободного пробега баллистических фононов в зависимости от геометрических параметров образца (толщины образца, длины образца и пр.), шероховатости границ (среднеквадратичной шероховатости, длины корреляции) и свойств фононного газа (температуры, длины волны фононов, направления волнового вектора и теплового потока, поляризации).

3. Сформулирована модель для расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок, не содержащая подгоночных параметров и учитывающая шероховатость поверхности, а также анизотропию переноса тепла в продольном и поперечном направлениях.

4. Впервые проведены расчёты эффективной теплопроводности наноплёнок с учётом указанных в предыдущих пунктах факторов. Показано хорошее согласие расчётных и экспериментальных данных.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечивается строгостью используемого математического аппарата, адекватностью физических моделей и подтверждается сравнением результатов расчетов с экспериментальными данными, известными аналитическими моделями и результатами, полученными другими авторами.

#### **Теоретическая значимость работы**

1. Развита полноценная теоретическая основа расчёта процессов рассеяния фононов на шероховатых поверхностях наноструктур в баллистическом режиме теплопереноса в зависимости от ряда определяющих факторов: геометрических параметров образца (толщины образца, длины образца и пр.), шероховатости границ (среднеквадратичной шероховатости, длины корреляции) и свойств фононного газа (температуры, длины волны фононов, направления волнового вектора и теплового потока, поляризации).

2. Разработана модель расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок, которая не содержит подгоночных параметров и базируется на детальном рассмотрении процессов взаимодействия фононов с шероховатой границей образца.

#### **Практическая значимость работы**

Разработана методика оценки эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок в зависимости от ряда определяющих факторов: температуры, толщины и шероховатости поверхности образца. Результаты, полученные для пленок кремния, показали хорошее согласие с экспериментальными данными. Поэтому данный метод может быть использован для создания цифровых двойников полупроводниковых структур с необходимыми теплофизическими свойствами (эффективным коэффициентом теплопроводности) и проектирования соответствующего оборудования.

## **Основные положения диссертации, выносимые на защиту**

1. Статистическая модель расчёта взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями твёрдых тел и определения длин свободного пробега баллистических фононов.

2. Модель расчета эффективной теплопроводности пленок в широком диапазоне температур и толщин пленок с учетом размерного эффекта и параметров шероховатости (среднеквадратичной шероховатости и длины корреляции).

3. Результаты анализа факторов, влияющих на рассеяние фононов на границе образца: температуры, шероховатости, толщины плёнки, поляризации фононов, угла наклона при падении фононов на поверхность.

4. Результаты расчетов длин свободного пробега баллистических фононов и эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины и различных параметров шероховатости.

## **Личный вклад автора**

Представленные результаты были получены автором либо при его непосредственном участии. В частности, автором был проведен анализ существующих моделей эффективной теплопроводности с учетом размерного эффекта и характера рассеяния от границы образца (параметра зеркального рассеяния). Разработан статистический метод расчета взаимодействия фононов с шероховатой границей образца; метод расчета длины свободного пробега баллистических фононов при взаимодействии с шероховатой границей пленок; модель расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом размерного эффекта и многофакторного характера рассеяния фононов на шероховатой границе. Разработаны программные коды, позволяющие проводить расчет эффективной теплопроводности пленок кремния в широком диапазоне температур, толщин и параметров шероховатостей.

## **Апробация работы**

Основные результаты работы были представлены на следующих конференциях:

1. XXI Школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и теплообмена в энергетических установках» (22—26 мая 2017 г., Санкт-Петербург)

2. Международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (9—11 октября 2017 г., Москва)

3. XV Курчатовская междисциплинарная молодежная научная школа (14-17 ноября 2017, Москва)

4. XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15) (15—17 октября 2018 г., Москва)

5. Седьмая Российская национальная конференция по теплообмену (РНКТ-7) (22—26 октября 2018 г., г. Москва)

6. V международная конференция и молодежная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2019) (21—24 мая 2019 г., Самара)

7. Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных и специалистов "Авиационные двигатели и силовые установки" (28-30 мая 2019 г., Москва)

8. Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодых ученых "XXXV Сибирский теплофизический семинар" (СТС-35), посвящённый 75-летию д.т.н., профессора В.И. Терехова (27—29 августа 2019 г., Новосибирск)

9. Всероссийская научная конференция с международным участием "Семинар вузов по теплофизике и энергетике" (21—23 октября 2019 г., Санкт-Петербург)

10. III международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетике» (19–22 октября 2020, НИУ «МЭИ», Москва)

11. VI Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» (22-29 августа 2021 г., Севастополь)

12. Всероссийская научная конференция «XII Семинар ВУЗов по теплофизике и энергетике» (25-27 октября 2021, Сочи)

13. III международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (25–27 октября 2021 г., Москва)

### **Публикации**

Основные результаты по теме диссертации отражены в 38 публикациях, из них 17 статей из Перечня рецензируемых научных журналов ВАК РФ, 15 работ в изданиях, входящих в международные базы цитирования Scopus и 5 работ – Web of Science, а также 30 публикаций – РИНЦ.

### **Соответствие паспорта специальности**

Соответствие диссертации формуле специальности 01.04.14 «Теплофизика и теоретическая теплотехника» (технические науки): работа посвящена теоретическому исследованию свойств теплопроводности и процессов рассеяния теплоты на шероховатых поверхностях полупроводниковых наноструктур на примере пленок кремния.

Отражённые в диссертации научные положения соответствуют области исследования специальности 01.04.14 «Теплофизика и теоретическая теплотехника»: аналитические и численные исследования теплофизических свойств веществ в твердом состоянии.

### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 116 страницах, содержит 46 рисунков и 1 таблицу. Библиографический список содержит 114 наименований.

## **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность работы, сформулированы цели и задачи исследования, сформулированы положения, определяющие новизну и практическую ценность полученных результатов, а также положения, выносимые на защиту; кратко изложено содержание глав диссертации.

**Глава 1** посвящена обзору и сравнению существующих методов и подходов к расчету теплопроводности. В выводах сформулированы основные задачи исследования.

Переносчиками тепла в полупроводниках и диэлектриках являются квазичастицы фононы – кванты упругих волн, распространяющихся в твёрдых телах. Описание состояния фононного газа основывается на решении уравнения переноса Больцмана для фононов в приближении времени релаксации

$$\mathbf{v}\nabla T \frac{\partial f}{\partial T} = \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{v}$  – скорость фононов, м/с, равная групповой скорости упругой волны;  $\omega$  – частота волны, с<sup>-1</sup>;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, м<sup>-1</sup>;  $T$  – температура твердого тела, К;  $f$  – искомая неравновесная функция распределения фононов по энергиям;  $f_0$  – равновесная функция Бозе-Эйнштейна,  $\tau$  – время релаксации фононного газа, с.

Из решения уравнения (1) следует выражение для расчета теплопроводности

$$\kappa(T) = \sum_j C_{ph} v_{g,j} l_j \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (2)$$

где суммирование ведется по поляризациям  $j$ ;  $C_{ph}$  – фононная теплоемкость,  $C_{ph}(\omega, T) = \hbar\omega \partial f_0 / \partial T$ ;  $l_j$  – длина свободного пробега фонона,  $l_j = v_{g,j} \tau$ ;  $v_{g,j}$  – групповая скорость фонона,  $v_{g,j} = d\omega/dk$ ;  $v_{p,j}$  – фазовая скорость фонона,  $v_{p,j}(\omega) = \omega/k$ ;  $\omega = f_j(k)$  – дисперсионные соотношения.

При распространении фононов в твердых телах возможны следующие процессы взаимодействия. Во-первых, это взаимодействие фононов друг с другом, среди которых основную роль играют процессы при участии трех фононов. Во-вторых, это процессы рассеяния фононов на изотопах, дефектах и примесях (нерегулярностях решетки). В-третьих, это взаимодействие с границами образца (в том числе реальными шероховатыми поверхностями).

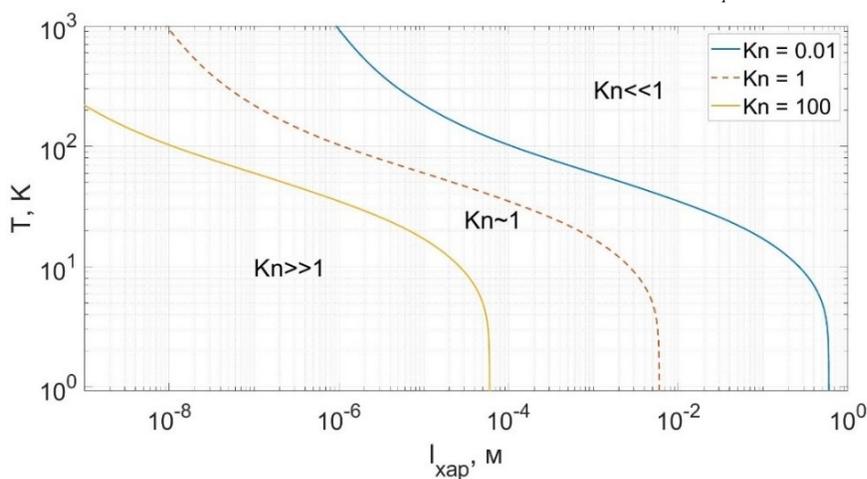
На данный момент задача о распространении тепла в массивных твердых телах является хорошо изученной. Так в классической теории теплопроводности рассматриваются объекты, характерный размер которых  $L$  значительно превышает длину свободного пробега переносчиков тепла в макроскопическом образце,  $l_\infty$ . Другими словами, вводя безразмерный параметр – число Кнудсена,  $\text{Kn} = l_\infty / L$ , можно утверждать, что существующая теория теплопроводности, построенная на использовании закона Фурье, применима для значений  $\text{Kn} \ll 1$  – в диффузионном режиме теплопереноса.

При уменьшении размеров образца (в микро- и особенно в наноструктурах) до размеров меньше длин свободного пробега фононов в объёме образца влияние границ на теплоперенос играют определяющую роль, а влияние внутренних процессов взаимодействия (фононов друг с другом или с нерегулярностями решетки) менее ощутимо; что принципиально отличает его от диффузионного режима. В связи с этим выделяют два типа теплопереноса в структурах микро и наномасштаба:

1. баллистический режим,  $Kn \gg 1$ , когда длины свободного пробега переносчиков теплоты – фононов в макроскопических образцах – во много больше характерного размера рассматриваемого образца; фононы почти не взаимодействуют друг с другом, свободно распространяются внутри структуры и рассеиваются на границе образца (на интерфейсе в случае сверхрешеток);

2. диффузионно-баллистический,  $Kn \sim 1$ , когда часть фононов участвует в баллистическом переносе, а часть в диффузионном, соответствующем классическому закону теплопроводности в макроскопическом образце.

На основе выражения (2) сформулирован метод оценки режима теплопереноса по числу Кнудсена. В качестве примера выполнен расчет для кремния и получена диаграмма (рис. 1), которая позволяет оценить режим теплопереноса в зависимости от величины характерного размера образца,  $l_{хар}$ , и температуры,  $T$ .



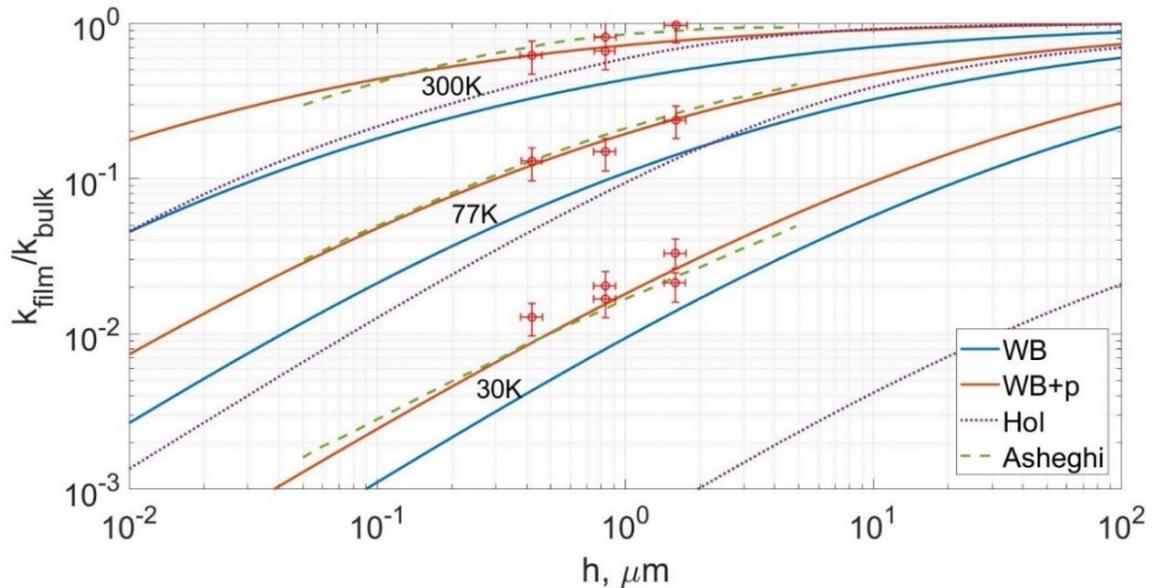
**Рис. 1.** Оценка режима теплопереноса для кремния:  $Kn \ll 1$  – диффузионный;  $Kn \sim 1$  – диффузионно-баллистический;  $Kn \gg 1$  – баллистический режим.

Существующие теории теплопроводности, учитывающие размерный эффект, строятся на оценке длины пробега баллистических фононов в зависимости от числа Кнудсена. При этом влияние реальных (шероховатых) границ на теплопроводность заменяется параметром зеркального отражения  $p$ , который характеризует характер процессов взаимодействия – долю фононов, отраженных от поверхности зеркально,  $p$ , или диффузно,  $1 - p$ .

На основе проведенных расчетов эффективной теплопроводности пленок кремния (рис. 2) показано, что параметр зеркального отражения играет роль подгоночного параметра. Варьирование  $p$  от 0 до 1 приводит к широкому разбросу значений эффективной теплопроводности и сильной неопределенности результата. Это обстоятельство не позволяет использовать существующие методы учета размерного эффекта для адекватной оценки эффективной теплопроводности.

Общим недостатком существующих моделей переноса тепла в наноструктурах является отсутствие учета структуры реальной шероховатой границы и статистической теории взаимодействия фононов с такой границей твердого тела. И, как следствие, невозможность установления влияния параметров шероховатости (высоты, длины корреляции и пр.) и свойств фононного газа (температура, анизотропия потока фононов и пр.) на теплоперенос.

Таким образом показано, что возникает фундаментальная задача разработки новой надежной и достоверной модели расчета процессов взаимодействия фононов с шероховатыми границами твердых тел, определения длины пробега баллистических фононов и расчету эффективной теплопроводности.

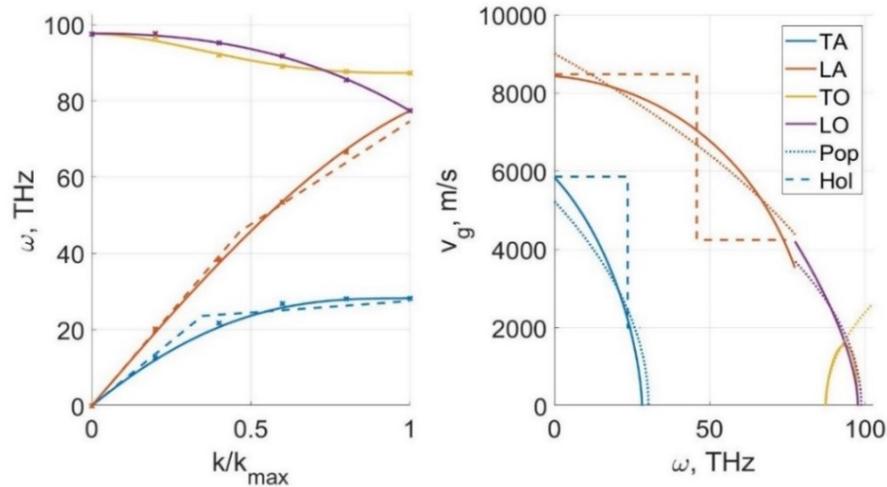


**Рис. 2.** Эффективная теплопроводность вдоль пленок кремния в диапазоне толщин от 10 нм до 100 мкм: WB – модифицированная модель Фукса-Зондхаймера при условии диффузного отражения ( $p=0$ ); WB+p – та же модель при  $p=0.4, 0.5$  и  $0.8$  для температур  $T=30$  К,  $70$  К и  $300$  К, соответственно; Hol – модель Холленда при  $p=0$ . Asheghi – результаты расчета теплопроводности, основанные на модели Фукса-Зондхаймера; точки соответствуют экспериментальным данным [3].

**В главе 2** проведен анализ факторов (параметров), которые необходимо учитывать при рассмотрении теплопереноса и расчете эффективной теплопроводности наноструктур. Выделим следующие основные тезисы из проведенного анализа.

Во-первых, принципиальным является то, что анализ теплопереноса в полупроводниках и диэлектриках строится на рассмотрении статистики фононного газа, состояние которого в целом определяется **температурой** (статистика Бозе-Эйнштейна).

Во-вторых, свойства фононного газа зависят от свойств кристаллической решетки, в частности, от **модели дисперсии**. Так в материалах с алмаз-подобной кристаллической решеткой (кремний, германий, алмаз) фононный газ состоит из акустических и оптических фононов продольной и поперечной **поляризации**. В данной работе для описания дисперсии применяется полиномиальная аппроксимация реальных дисперсионных кривых вместо широко распространенных линейного, двулинейного и кубического законов. Это дает возможность более строго рассмотреть динамику фононов в кристаллической решетке (рис. 3).



**Рис. 3.** Дисперсионные кривые и групповые скорости для кремния в направлении [100]. TA и LA – поперечная и продольная акустические волны, TO и LO – поперечная и продольная оптические волны. Точками указаны экспериментальные данные, сплошные линии – полиномиальная аппроксимация, пунктирные – двулинейная, «Pop» – кубическая.

В виду малых скоростей распространения оптические фононы в расчете теплопроводности не учитываются, но их участием в диффузионном режиме теплопереноса пренебречь нельзя. Поэтому в рамках расчета теплопроводности в баллистическом режиме рассматриваются именно акустические фононы трех поляризаций: продольной LA и двух поперечных TA.

Также отметим, что в работе рассматривается квазиизотропное приближение и свойства в направлении [100] кристаллической решетки, вдоль которого поперечные волны являются вырожденными (ветви совпадают:  $TA_1=TA_2=TA$ ). Как показано в ряде работ по расчету теплопроводности из первых принципов, данное допущение дает ошибку в пределах 5% для широкого диапазона температур.

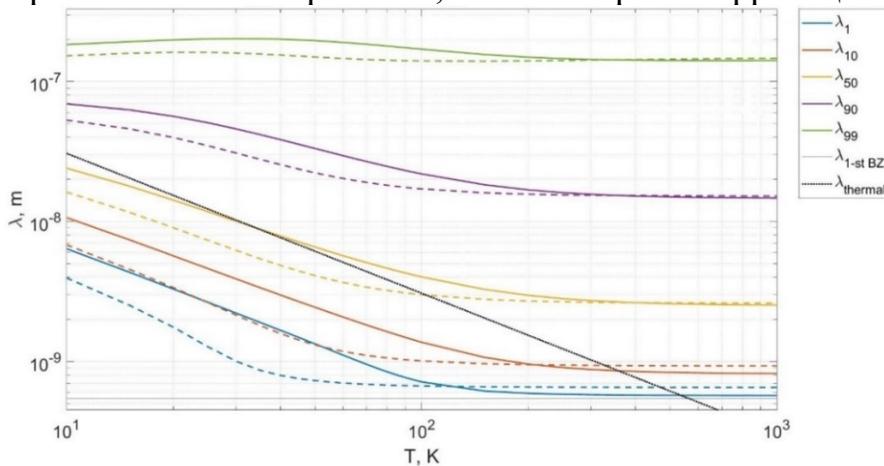
Дисперсионные соотношения необходимы при определении скоростей (групповых и фазовых), а также длин волн фононов. На рис. 4 проведена оценка длин волн фононов на основе расчета кумулятивного вклада различных длин волн фононов в теплопроводность. Оказалось, что существенный вклад в теплоперенос вносят фононы с длинами волн больше или порядка размеров шероховатостей.

В-третьих, наличие размерного эффекта, приводит к непосредственному влиянию геометрии образца (**толщины пленки**, ширины, радиус изгиба и пр.) на возможные (разрешенные) состояния фононов и, как следствие, на свойства фононного газа в целом (теплопроводность). В том числе появляется выраженная **анизотропия свойств** в поперечном и продольном направлении пленок. Это связано с тем, что в продольном направлении возможен лишь ограниченный дискретный набор состояний, равный количеству полуволен фононов, укладывающихся по толщине пленки. В то время, как в продольном направлении такие ограничения

отсутствуют и можно говорить о непрерывном наборе состояний. Поэтому эффективная теплопроводность зависит от рассматриваемого **направления распространения тепла** в наноструктурах.

В-четвертых, как отмечалось в главе 1, существенную роль в теплопереносе оказывает **взаимодействие баллистических фононов с шероховатыми границами наноструктур**. Это фундаментальная и основополагающая задача, без решения которой невозможно создать надежный и достоверный метод расчета эффективной теплопроводности. Подчеркнем, что природа как самого процесса взаимодействия, так и шероховатости границы образца, является статистической, поэтому задача должна решаться статистическими методами. В частности, эксперименты показывают, что на эффективную теплопроводность наноструктур (на примере нанонитей) влияют **среднеквадратичная шероховатость и длина/интервал корреляции**. В целом стоит отметить, что вопрос о детальном рассмотрении структуры реальной поверхности и о влиянии ее морфологии на теплоперенос слабо освещены в литературе; не смотря на определяющее влияние процесса рассеяния фононов на шероховатой границе образца на теплоперенос.

Таким образом показано, что задача расчета теплопроводности является многофакторной. Проанализировано влияние различных определяющих величин на теплоперенос. В частности, необходима разработка новой модели взаимодействия фононов с шероховатой границей, учитывающей как значение среднеквадратичной шероховатости поверхности, так и интервал корреляции.



**Рис. 4.** Длины волн фононов в диапазоне от минимальной до  $\lambda_{\delta}$ , которые дают вклад  $\delta, \%$  в эффективную теплопроводность пленок кремния.

**Глава 3.** Данная глава посвящена изучению взаимодействия фононов с шероховатыми границами наноструктур. Эта проблема пока что практически не исследована. Это одно из «белых пятен» нанотеплофизики. Сложность этой задачи связана с тем, что границы твёрдых тел представляют собой шероховатые поверхности со случайными распределениями формы.

Данная проблема отсутствует в классической теплофизике. Дело в том, что из-за малости размеров наноструктур фононы чаще взаимодействуют с границами твёрдых тел, чем друг с другом, как это имеет место в макросистемах. Поэтому при  $Kn > 1$  теплопроводность наноструктур в большей степени зависит от взаимодействий

фононов с границами, чем от фонон–фононных взаимодействий. При этом надо иметь в виду, что фононы – кванты упругих волн, распространяющихся в твёрдых телах, поэтому следует учитывать их волновые свойства. Главным параметром, учитывающим такое взаимодействие при расчёте теплопроводности, является вероятность зеркального отражения от границы, обозначаемая, как  $p$ . В большинстве работ, посвящённых расчётам теплопроводности наноструктур, величина  $p$  используется, как подгоночный параметр. Подчеркнем, что в существующих исследованиях данной проблемы полностью отсутствуют ссылки на многочисленные монографии и обзоры, посвящённые статистическим методам изучения взаимодействия волн с шероховатыми поверхностями.

Теперь перейдём к рассмотрению процесса рассеяния на шероховатой границе в деталях, выделив и проанализировав те параметры, которые играют определяющую роль. Для этого процесс последовательного взаимодействия фононов с шероховатыми границами представим как комбинацию двух процессов, сменяющих друг друга:

**1) Процесс рассеяния на шероховатой границе**, т.е. непосредственный расчет изменения импульса фонона в процессе взаимодействия с шероховатой границей. Анализ строится на следующих допущениях. Рассматриваются случайные поверхности, для которых образование неровностей поверхности является результатом действия большого числа независимых факторов. А именно – двумерная поверхность  $z = \zeta(x, y)$  с образующими вдоль оси  $y$  (рис. 5), для которой углы наклона (модуль производной нормальной случайной функции  $n = |\nabla\zeta|$ ) распределены по закону Гаусса:

$$w_1(n) = \frac{1}{\gamma_x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{n^2}{2\gamma_x^2}\right), \quad (0 \leq n < \infty). \quad (3)$$

Далее в выражении (3) перейдем от модуля производной профиля  $n$  к алгебраическому значению, принимающему как положительные, так и отрицательные знаки. И вместо градиента  $n = |\nabla\zeta|$  рассмотрим угол наклона профиля  $\varphi$  в соответствии с соотношением  $n = \tan \varphi$ . Тогда нормальное распределение (3) примет следующую форму

$$w(\varphi) = \frac{1}{\gamma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\tan^2 \varphi}{2\gamma^2}\right) \frac{1}{\cos^2 \varphi}, \quad (-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2). \quad (4)$$

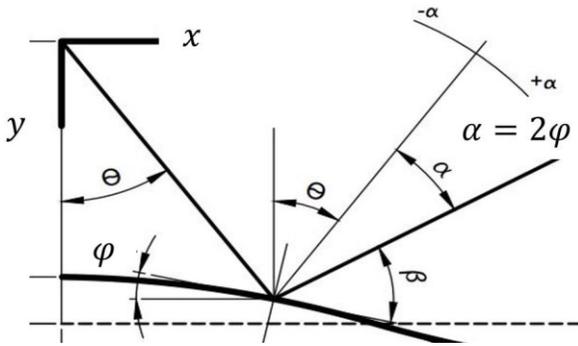
Обратим внимание, что для описания шероховатой поверхности необходимо задать два параметра: среднеквадратичное отклонение  $\sigma$  и интервал корреляции  $l$ , при этом дисперсия первой производной  $\overline{(\zeta')^2} \equiv \gamma^2$  определяется по выражению  $\gamma = \sigma/l$ .

Затем к профилю поверхности применяем приближение Кирхгофа – рассмотрим касательные плоскости, от которых происходит отражение фононов. Тогда для произвольного фонона, распространяющегося под углом  $\theta$  к нормали поверхности пленки, угол отражения составит  $\psi = \theta - 2\varphi$ , где  $\varphi$  – угол наклона касательной плоскости к средней линии профиля (рис. 5).

**2) процесс распространения от одной границы к противоположной.** Рассматривается баллистический режим переноса, при котором отсутствуют внутренние процессы взаимодействия (фонон-фононные и рассеяние на неоднородностях решетки). Траектория движения фононов между границами считается линейной, а скорость распространения, зависящей от частоты фонона. Так для фонона, отраженного от шероховатой границы под углом  $\psi = \theta - 2\varphi$  к нормали пленки, длина свободного пробега запишется как

$$l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) = \frac{L}{\cos(\theta - 2\varphi)}. \quad (5)$$

Данную длину свободного пробега будем именовать локальной (индекс *local*). Обратим внимание, что локальная неоднородность поверхности учитывается через угол  $\varphi$ , значение которого меняется от  $-\varphi_{\max}$  до  $\varphi_{\max}$ .



**Рис. 5.** Основные геометрические параметры при отражении фононов от шероховатой границы:  $\theta$  – угол падения;  $\varphi$  – угол, характеризующий наклон профиля относительно средней линии;  $\beta$  – угол «отражения»;  $\alpha = 2\varphi$  – угол, характеризующий разницу между зеркальным отражением и диффузным. Указанные углы задаются относительно нормали к поверхности.

Следующий шаг – учет шероховатости границы. Для этого воспользуемся функцией распределения углов наклона (4) и определим среднюю длину свободного пробега  $l_b$  между взаимодействиями фононов с шероховатой границей, осредненную по углам наклона поверхности образца (шероховатостям)

$$l_b(\gamma, \theta, L) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} w_{\theta}(\varphi, \gamma) l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) d\varphi. \quad (6)$$

После подстановки (5) в (6) получаем итоговое расчетное выражение

$$l_b(\gamma, \theta, L) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} w_{\theta}(\varphi, \gamma) \frac{L}{\cos(\theta - 2\varphi)} d\varphi = L b_s(\gamma, \theta), \quad (7)$$

где **форм-фактор**  $b_s(\gamma, \theta)$  не является постоянным, как в классической теории размерного эффекта, а **становится зависящим от градиента наклона шероховатого профиля**  $\gamma$  и угла падения  $\theta$

$$b_s(\gamma, \theta) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} \frac{w_{\theta}(\varphi, \gamma)}{\cos(\theta - 2\varphi)} d\varphi. \quad (8)$$

Полученное выражение обладает той же особенностью, что и классические формулы (Займан, Соффер и пр.): при стремлении угла отражения  $\psi = \theta - 2\varphi$  к  $\pi/2$ , т.е. когда фононы распространяются преимущественно вдоль образца (случай скользящих углов), форм-фактор и длина свободного пробега фононов неограниченно возрастают (как следствие, и теплопроводность). Однако, при анализе распространения теплоты в реальном образце известно, что длина свободного пробега конечна, так как размеры образца ограничены во всех трёх направлениях, а не только по толщине (для плёнок). Поэтому нужно учитывать, что рассеяние фононов в пленках происходит не только на поверхностях, ограничивающих образец по толщине, но также по ширине и длине.

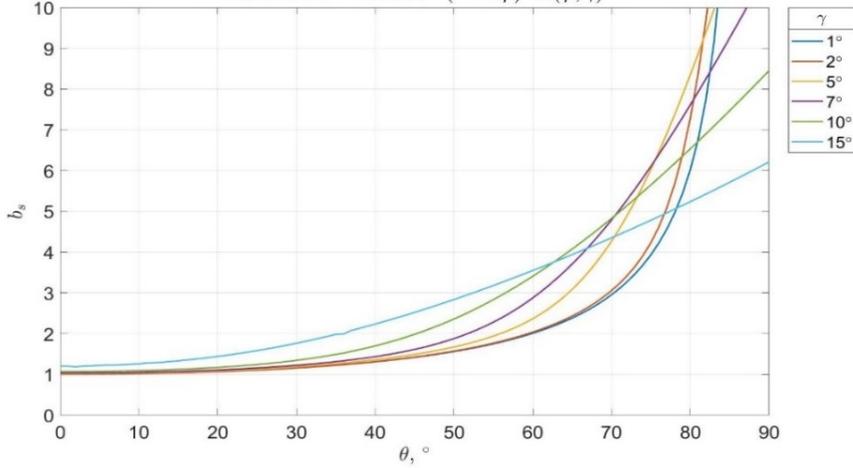
Отдельно обратим внимание на диффузионно-баллистический режим теплопереноса (при числах Кнудсена порядка единицы), когда длина пробега фононов будет ограничена внутренними процессами взаимодействия, такими как рассеяние на дефектах и неоднородностях решетки, фонон-фононными процессами и пр. В этом случае необходимо в качестве длины свободного пробега выбирать наименьшее значение между длиной баллистических фононов (7) и длиной пробега, соответствующей внутренним процессам взаимодействия фононов.

Результаты расчета форм-фактора (8) представлены на рис. 6. Обратим внимание, что в классической теории величина  $b_s$  постоянная и равна 0,8 для пластины и 1,12 для стержня. Заметим, что при угле наклона профиля  $\gamma = 0$  поверхность гладкая, а зависимость  $b_s(\gamma, \theta)$  подчиняется закону косинуса  $b_s(\theta) = \cos^{-1} \theta$ . При увеличении  $\gamma$  зависимость форм-фактора меняется. Так при малых углах падения  $\theta$  значение  $b_s$  постоянно и слабо зависит от  $\gamma$ , а при скользящих углах падения величина  $b_s$  неограниченно растёт, что связано с отсутствием препятствий на пути распространения отраженных фононов. А при росте крутизны профиля  $\gamma$  фононы чаще сталкиваются с границей образца, поэтому значение  $b_s$  растет до конечной величины.

Форм-фактор имеет достаточно простую и наглядную интерпретацию – он показывает, во сколько раз длина свободного пробега фононов превосходит толщину образца. Так, при движении фононов по нормали к поверхности длина пробега  $l_b$  ограничена толщиной образца  $L_z$ , а при скользящих углах отражения наблюдается значительный рост длины пробега в  $b_s$ -раз.

Таким образом, предложен совершенно новый метод анализа процессов рассеяния фононов на шероховатой границе твердого тела, базирующийся на рассмотрении углов наклона случайной шероховатой поверхности и статистическом анализе углов отражения фононов от такой поверхности. Продемонстрировано применение разработанного метода для расчета длин свободного пробега фононов между последовательными взаимодействиями с границей твердого тела. Отмечен ряд принципиальных отличий от существующих моделей. Во-первых, это учет влияния крутизны шероховатого профиля на длину пробега баллистических фононов. Во-

вторых, разработанный метод позволяет оценить влияние не только «относительно гладких» границ, когда длины корреляции малы, что имеет место в существующих теориях; но и установить влияние «относительно крутых» шероховатостей, что, как показывают эксперименты, имеет место для случая атомарной шероховатости в наноструктурах.



**Рис. 6.** Зависимость форм-фактора (8) от угла падения  $\theta$  и градиентов наклона профиля  $\gamma$ .

**В главе 4** сформулирована модель расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом факторов, влияющих на теплоперенос и рассмотренных в главе 2, а также с учетом новой статистической модели взаимодействия фононов с шероховатой границей, предложенной в главе 3.

Расчетное выражение для эффективной теплопроводности вдоль плёнок с учетом размерного эффекта и анизотропии может быть записано в следующей форме:

$$k_{in-plane}(L_z, T, \gamma, j) = \sum_{k_z} \left( \int_{k_{min}}^{k_{max}} C_{ph}[\omega_j(k), T] v_{g,j}(k) l_b[\gamma, \theta(k, k_z), L_z] \frac{k dk}{6\pi^2} \right) \Delta k_z, \quad (9)$$

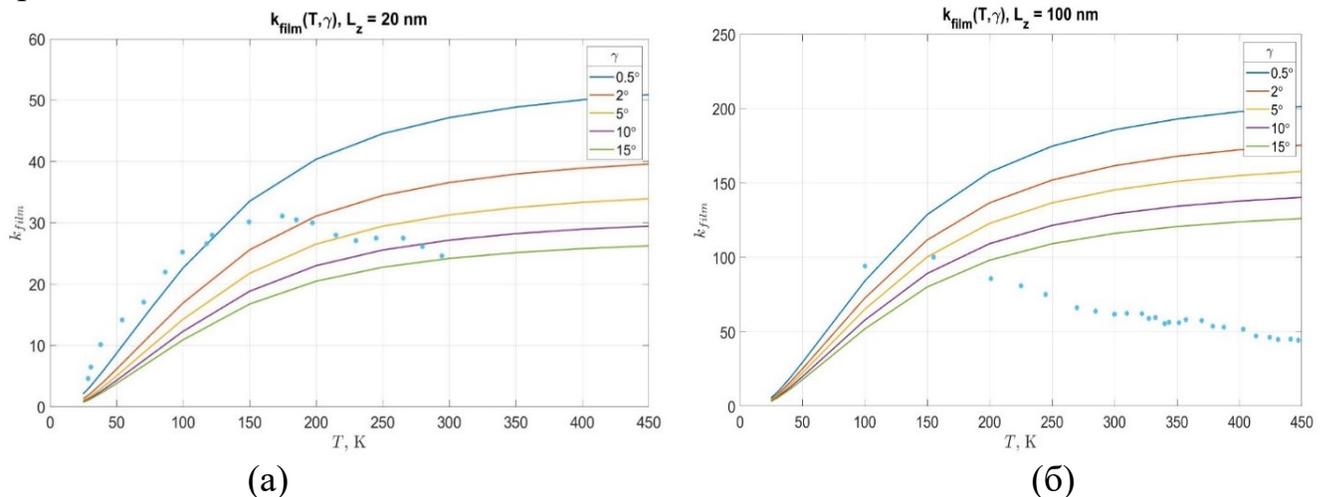
$$C_{ph}[\omega_j(k), T] = \hbar \omega_j(k) \frac{\partial f_{BE}[\omega_j(k), T]}{\partial T},$$

где  $\omega$  – частота фонона,  $j$  – поляризация,  $C_{ph}$  – фононная теплоемкость,  $C_{ph} = \hbar \omega \cdot \partial f_{BE} / \partial T$ ;  $f_{BE}$  – функция распределения Бозе-Эйнштейна,  $f_{BE} = [\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1]^{-1}$ ;  $v_{g,j}$  – групповая скорость фононов;  $\theta$  – угол наклона падающей волны;  $l_j$  – длина свободного пробега фононов. Обратим внимание, что выражение (9) в предельном случае  $L_z \rightarrow \infty$  переходит в известное выражение для теплопроводности изотропного макроскопического образца.

Подчеркнём принципиальные отличия выражения (9) от существующих широко распространенных моделей. Во-первых, учёт взаимодействия фононов с границами образца строится на рассмотрении градиентов наклона статистически случайной поверхности, моделирующей реальную шероховатую границу образца (глава 3). Во-вторых, так как конечная толщина пленки (размерный эффект) приводит к существованию ограниченного набора состояний в поперечном направлении, то в

выражении (9) проводится непосредственное суммирование по разрешенным волновым числам в поперечном направлении,  $k_z$ . Именно поэтому интеграл (10) записан относительно  $k$ -пространства (пространства обратной решетки), а не частот, что широко используется при рассмотрении изотропного приближения. Другими словами, это позволяет учесть анизотропию пространства состояний. В-третьих, перенос теплоты осуществляется в продольном направлении, что учитывается в выражении (9) путем рассмотрения проекции волнового вектора на направление вдоль пленки. Более того, можно обобщить выражение провести (9) на случай расчета эффективной теплопроводности поперек плёнки путем рассмотрения проекция на поперечное направление.

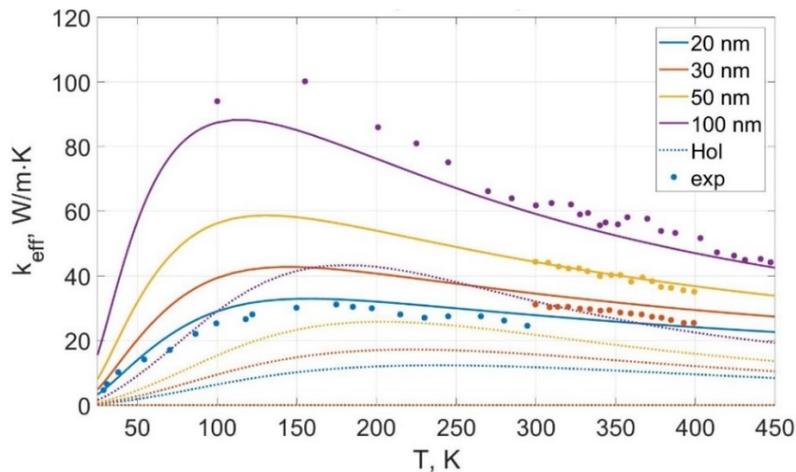
Результаты расчета эффективной теплопроводности вдоль пленки кремния в квазиизотропном приближении представлены на рис. 7 и 8 и сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными. На рис. 7 а видно, что для пленки 20 нм в диапазоне температур от 25 до 300 К, где основной механизм переноса тепла – баллистический, наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными. Из рис. 7 б можно заключить, что для пленки 100 нм в диапазоне температур от 100 до 200 К, где основной механизм переноса тепла – баллистический, наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными. При температурах выше 200 К начинают играть роль внутренние процессы рассеяния (фонон-фононные и на дефектах), поэтому необходимо рассмотрение диффузионно-баллистического режима переноса.



**Рис. 7.** Эффективная продольная теплопроводность плёнок кремния толщиной 20 нм (а) и 100 нм (б) для диапазона температур от 25 до 450 К. Линии соответствуют градиентам наклонов 0.5, 2, 5, 10 и 15 град; точки - экспериментальные данные [4].

На рис. 8 представлены результаты расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом баллистических фононов и внутренних процессов взаимодействия (фонон-фононными и на неоднородностях решетки), что позволило получить хорошее согласие с экспериментальными данными не только в области  $Kn \gg 1$  (как на рис. 7 а), но и при  $Kn \sim 1$ , т.е. в диффузионно-баллистическом режиме теплопереноса. При этом

для задания параметров шероховатости использовались следующие соотношения:  $\sigma_{rms} = 0.33h^{0.11}$ . Пунктирными линиями для сравнения показан расчет по модели Фукса-Зондхаймера при чисто диффузном отражении от границы ( $p = 0$ ) с применением подхода Холленда для расчета теплопроводности макроскопического образца. Видно, что варьирование  $p$  от 0 до 1 способно оказать существенное влияние на результат.



**Рис. 8.** Эффективная теплопроводность вдоль пленок кремния. Сплошные линии – модель авторов; пунктирные линии – модель Фукса-Зондхаймера; точки – экспериментальные данные [3,4].

Таким образом, результаты расчетов эффективной теплопроводности вдоль пленок кремния показали хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Но существенным является то, что на практике рассматривается лишь влияние толщины пленок на теплопроводность (т.е. лишь размерный эффект). При этом анализу шероховатости поверхности образца, которая существенно влияет на теплоперенос, не оказывается должного внимания, а имеющихся опытных данных недостаточно для всестороннего анализа теплопереноса.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Впервые развиты теоретические основы расчёта процессов рассеяния фононов на шероховатых поверхностях наноструктур, основанные на статистической теории случайных шероховатых поверхностей и анализе углов отражения от таких поверхностей.

2. Разработан метод расчета длины свободного пробега баллистических фононов при рассеянии от реальных шероховатых поверхностей пленок.

3. Разработана модель расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок, которая не содержит подгоночных параметров и базируется на детальном рассмотрении процессов взаимодействия фононов с шероховатой границей образца.

4. Разработан программный код для расчета эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины пленки и шероховатости поверхности.

5. Проведен комплексный расчет эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины и длины пленки, шероховатости образца (среднеквадратичной шероховатости и длины корреляции).

6. Получены диаграммы, позволяющие определить механизм переноса теплоты (диффузионный, диффузионно-баллистический или баллистический) в зависимости от температуры и толщины пленки кремния.

7. Показано, что необходимо проведение комплексных экспериментальных исследований по анализу влияния границ твердых тел с различными параметрами шероховатости на теплоперенос. Так как в настоящее время этому вопросу не уделяется должного внимания, опытные данные весьма скудные, и это накладывает существенные ограничения на дальнейшее совершенствование и создание надежных методов расчета теплофизических свойств наноструктур.

### ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ

1. Баринов А.А., Цао Ж., Хвесюк В.И. Баллистический перенос тепла в наноструктурах // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2016. Т. 5. С. 140-151.

2. Баринов А.А., Чжан К., Лю Б., Хвесюк В.И. Развитие методов расчета теплопроводности тонких пленок. // Наука и Образование: Научное издание. 2017. Т. 6. С. 56-71.

3. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V. I., and Zhang K. Updated Model for Thermal Conductivity Calculation of Thin Films of Silicon and Germanium // Phys. Atom. Nuclei. 2020. Vol. 83, no. 10, pp. 1538-1548. (Баринов А. А., Лю Б., Хвесюк В.И., Чжан К. Обновленная модель расчета теплопроводности тонких пленок кремния и германия. // Ядерная физика и инжиниринг. 2018. Т. 9, № 5. С. 433–444.)

4. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A New Approach to Calculation of the Kapitza Conductance between Solids // Tech. Phys. Lett. 2020. Vol. 46. P. 983–987. (Хвесюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы между твердыми телами // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46, вып. 19. С. 42-46.)

5. Liu B., Khvesyuk V.I., and Barinov A.A. The modeling of the Kapitza conductance through rough interfaces between solid bodies // Physics of the Solid State. 2021. Vol. 63, no. 7. P. 982-987. (Лю Б., Хвесюк В.И. и Баринов А.А. Моделирование проводимости Капицы через шероховатые интерфейсы между твердыми телами // Физика твердого тела. 2021. Т. 63, вып. 7. С. 982-987.)

6. Liu B., Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Wang M. Effect of interfacial roughness on thermal boundary conductance: An elastic wave model using the Kirchhoff approximation // International Journal of Mechanical Sciences. 2022. Vol. 218 P. 106993.

7. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Modeling of phonon diffusion using a Monte-Carlo method based on physics of phonon // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. Vol. 1368. P. 042051.

8. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A new look at Kapitza conductance calculation (thermal boundary resistance) // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. Vol. 1368. P.042035.
9. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Analysis of diffusion processes in a phonon gas // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. Vol. 1382. P. 012156.
10. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Development of acoustic and diffuse mismatch models for predicting the Kapitza resistance // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. Vol. 1382. P. 012155.
11. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. The effect of phonon diffusion on heat transfer // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. Vol. 1385. P.012046.
12. Khvesyuk V.I., Barinov A.A. Hierarchy of models for calculating the thermal conductivity in nanostructures // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2017. Vol. 891. P. 012352.
13. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Calculation of thermal boundary resistance based on the analysis of elastic waves propagating at the interface // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2020. Vol. 1565. P. 012025.
14. Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Liu B., Qiao W. A review to the specific problems of nano thermal physics // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2020. Vol. 1683, issue 2. P. 022073.
15. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Generalized model of Kapitza conductance across rough interfaces // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2057. P. 012110.
16. Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2057. P. 012111.
17. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. A new technique for modelling phonon scattering processes at rough interfaces and free boundaries of solids // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2022. Vol. 2150. P. 012021.

## **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Lim J. et al. Quantifying Surface Roughness Effects on Phonon Transport in Silicon Nanowires // *Nano Lett.* 2012. Vol. 12, № 5. P. 2475–2482.
2. Soffer S.B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // *J. Appl. Phys.* 1967. Vol. 38, № 4. P. 1710–1715.
3. Liu W., Asheghi M. Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers // *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 84, № 19. P. 3819–3821.
4. Ju Y.S., Goodson K.E. Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm // *Appl. Phys. Lett.* 1999. Vol. 74, № 20. P. 3005–3007.