

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

Диссертация
на соискание учётной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
доктор технических наук, профессор
Хвесьюк Владимир Иванович

Москва – 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
ВВЕДЕНИЕ.....	4
Глава 1. Обзор литературы.....	12
1.1. Особенности теплофизики наноструктур.....	12
1.2. Модели переноса тепла в наноструктурах	17
1.3. Эффективная теплопроводность нанопленок	21
1.4. Описание процесса рассеяния фононов на границе	27
1.5. Постановка цели и задач исследования	29
Выводы по главе 1	31
Глава 2. Анализ факторов, влияющих на эффективную теплопроводность	32
2.1. Дисперсионные кривые кремния.....	32
2.2. Анализ механизмов рассеяния фононов	36
2.3. Анализ характерных размеров (факторов), влияющих на перенос в наноструктурах.....	43
2.4. Установление влияния параметра зеркального отражения на эффективную теплопроводность пленок.....	48
Выводы по главе 2.....	67
Глава 3. Разработка модели взаимодействия фононов с шероховатой границей образца.....	69
3.1. Модель шероховатой границы.....	69
3.2. Методика расчета взаимодействия фононов с шероховатой границей.....	72
3.3. Расчет длины пробега баллистических фононов	85
Выводы по главе 3.....	89
Глава 4. Обновленная модель расчета эффективной теплопроводности нанопленок	90
4.1. Модель расчета теплопроводности нанопленок	90
4.2. Результаты расчета эффективной теплопроводности вдоль пленок кремния .	95

4.3. Влияние характерных геометрических параметров на теплопроводность пленок	101
Выводы по главе 4.....	106
ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ	107
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	108

ВВЕДЕНИЕ

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 особое 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 σ (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 σ / 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 σ : $p = \exp(-2\sigma^2 k^2 \cos^2 \theta)$, где k – волновое число фонона с длиной волны λ , $k = 2\pi / \lambda$; θ – 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 расчеты 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. Развиты полноценные теоретические основы 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 энергетики» (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 [3–23] 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 паспорту специальности

Диссертация соответствует 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-х глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 180 страницах, содержит 35 рисунков и 5 таблиц. Библиографический список содержит 130 наименований, в том числе 120 на иностранном языке.

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

В главе 2 проведен анализ факторов (параметров), которые необходимо учитывать при рассмотрении теплопереноса и расчете эффективной теплопроводности наноструктур.

Глава 3. Данная глава посвящена изучению взаимодействия фононов с шероховатыми границами наноструктур.

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.

Глава 1. Обзор литературы

1.1. Особенности теплофизики наноструктур

В течение примерно четверти века растет внимание к исследованиям теплофизических свойств нано- и микроструктур, что связано с исключительными перспективами, которые открываются при использовании этих структур практически во всех областях науки, техники, медицины и т.п. Исследования показывают наличие существенных отличий в характере переноса тепла внутри макроскопических тел и в малых телах размерами от нанометров до 10–20 мкм. Другая особенность этой проблемы – большое разнообразие объектов, требующих развития специальных теоретических и экспериментальных методов исследования. В связи с этим вопросы переноса тепла в твердотельных нано- и мезоструктурах являются в настоящее время областью активных исследований [24–27].

Начало строгому изучению процессов переноса тепла в твердых телах положил Фурье в своем знаменитом сочинении «Аналитическая теория тепла» в 1822 году, где был сформулирован закон Фурье. Это явилось началом разработки классической теории теплопроводности, представляющей перенос тепла как диффузионный процесс. Классическая теория теплопроводности является феноменологической, не указывающей на то, какие именно объекты являются переносчиками тепла.

В начале прошлого века появились две работы, ставшие основой для развития статистической термодинамики твердого тела. Это работа Эйнштейна 1907 года и работа Дебая 1912 года, существенно развившая идеи, заложенные в первой работе. Согласно Дебаю, носителями внутренней энергии в твердом теле являются распространяющиеся в нем классические упругие волны. Благодаря развитию квантовой механики в 1929 году появилась работа Пайерлса [28]. В ней заложены основы микроскопической теории переноса тепла в твердом теле. Исходной идеей является квантование классических упругих волн, распространяющихся в твердом теле. В результате микроскопический анализ

переноса тепла сводится к изучению кинетики газа, состоящего из квазичастиц – фононов. Одним из замечательных свойств этого газа является слабое взаимодействие фононов друг с другом (идеальный газ). Значит, для определения теплопроводности различных веществ достаточно использовать решения уравнения Больцмана, что широко практикуется при анализе свойств разреженных газов и плазмы. Соответствующие методы для макроскопических тел были развиты в работах Клеменса [29].

Описание состояния фононного газа основывается на решении уравнения переноса Больцмана для фононов в приближении времени релаксации [30]

$$\mathbf{v}\nabla T \frac{\partial f}{\partial T} = \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (1.1)$$

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

Из решения уравнения (1.1) следует выражение для расчета теплопроводности [30]

$$\kappa(T) = \sum_j C_{ph} v_{g,j} l_j \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (1.2)$$

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 классической теории теплопроводности рассматриваются объекты, характерный размер которых L значительно превышает длину свободного пробега переносчиков тепла в макроскопическом образце, l_{∞} . Другими словами, вводя безразмерный параметр – число Кнудсена, $Kn = l_{\infty} / L$, можно утверждать, что существующая теория теплопроводности, построенная на использовании закона Фурье, применима для значений $Kn \ll 1$ – 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. Количественно значения числа Кнудсена изменяются в диапазоне от 10^{-2} до 10 (последнее число следует из расчетов [31]).

Именно в баллистическом и диффузионно-баллистическом режимах теплопереноса возникает зависимость теплопроводности от размера образца – так называемый размерный эффект. В связи с этим вместо понятия теплопроводности

вводится эффективная теплопроводность $\kappa_{\text{eff}}(L)$. Это явление не может быть объяснено в рамках феноменологической теории диффузионного переноса, основанной на законе Фурье. В связи с этим перенос тепла в областях изменения L , где $\kappa_{\text{eff}} = f(L)$, часто называется недиффузионным. Дело в том, что формально тепловой поток в приближении Фурье и без него записывается одинаково: $\mathbf{q} = -\kappa_{\infty} \nabla T$ и $\mathbf{q} = -\kappa_{\text{eff}} \nabla T$. Различие заключается в свойствах κ_{∞} и κ_{eff} . Величина κ_{∞} не зависит от размеров, формы макроскопического тела и направления теплового потока, если вещество, из которого изготовлено тело, однородно. В отличие от κ_{∞} величина κ_{eff} , определяющая недиффузионный перенос тепла, зависит от размеров, формы нано- и микротел, а также от направления тепловых потоков в них. Недиффузионный перенос тепла означает, что часть тепла переносится баллистическими фононами, которые не испытывают столкновений при движении от одной границы к противоположной.

Зависимость теплопроводности от размера образца – важнейший критерий, отличающий перенос тепла в наноструктурах от переноса в макроскопических телах. Поэтому он очень часто упоминается как в обзорах [5,27], так и в оригинальных работах. Однако теплопроводность зависит и от формы образца. Это следует из того, что, например, длины свободного пробега фононов отличаются в два раза у нанопленок и нанонитей, у которых одинаковы толщина и диаметр [32]. Еще одна важная особенность – анизотропия теплопроводности наноструктур, проявляющаяся даже для идеальных монокристаллических исходных материалов. Это показано в расчетных исследованиях теплопроводности нанопленок [33] и графеновых нанолент [34].

Особые свойства переноса тепла в наноструктурах определяются двумя факторами. Первый – форма и размеры изучаемых объектов. Второй – наличие в фононном газе двух типов взаимодействия фононов друг с другом. Один тип – N -процессы, характеризующиеся тем, что суммарный импульс и энергия квазичастиц, участвующих в них, одинаковы до и после взаимодействия. Соответственно, и газ в целом не теряет энергию и импульс. Второй тип

представляют U -процессы. В результате взаимодействий этого типа фононы передают часть импульса решетке, а суммарная их энергия не изменяется.

Решения уравнения Больцмана с учетом взаимодействий фононов обоих типов показывают, что при низких температурах (или $l_{\infty}/L > 1$) реализуется недиффузионный режим благодаря доминирующей роли N -процессов. В области низких температур или малых продольных размеров образцов нанопленок и нанонитей осуществляется гидродинамический перенос тепла, представляющий собой течение фононного газа как целого под действием градиента давлений. Параллельно с гидродинамической моделью для описания переноса тепла в продольном направлении используются и методы, основанные на решении уравнения Больцмана. В поперечном направлении гидродинамическая модель неприменима. Для описания переноса тепла используются кинетические методы, основанные на решении уравнения Больцмана. В обоих случаях имеет место так называемый диффузионно-баллистический перенос тепла, когда одна часть фононов испытывает взаимодействия в промежутке между границами структуры (диффузионный перенос), а другая переносит тепло от одной границы до другой без взаимодействий внутри твердого тела (баллистический перенос).

Отдельно подчеркнём, что важно учитывать направление теплового потока, так как свойства наноструктур даже при идеальной изотропии микроскопического строения являются анизотропными. Согласно результатам расчетов [33], степень анизотропности монокристаллической нанопленки может достигать величины 1.8. Для углеродных нанотрубок важно указывать керальность то есть расположение шестиугольных ячеек относительно оси системы, а также является ли трубка одностенной или многостенной. Сказанное выше означает, что в общем случае задачи, связанные с исследованием распространения тепла в области значений $Kn \geq 1$, более разнообразны, чем в области $Kn \ll 1$. Следствием этого является наличие большого числа различных моделей, описывающих перенос тепла в таких системах.

1.2. Модели переноса тепла в наноструктурах

Вплоть до начала шестидесятых годов прошлого века работы по теории переноса тепла были сосредоточены на развитии методов определения теплопроводности макроскопических твердых тел. Эти методы включают в себя учет рассеяния фононов как друг на друге, так и на различных видах нарушений идеальной структуры твердотельных решеток, например, связанных с наличием примесей, дефектов и др.

В [35] было решено кинетическое уравнение с учетом только N -процессов взаимодействия фононов. Показано, что в этом случае фононный газ распространяется как целое вдоль нанонитей и нанопленок, т.е. реализуется так называемый гидродинамический режим переноса тепла. В [36] выполнено подобное исследование, в котором наряду с N -процессами учитывались как U -процессы, так и процессы торможения фононов, возникающие из-за несовершенств кристаллов. Было показано, что в условиях, когда в фононном газе доминируют N -процессы, направленный импульс, полученный фононным газом под действием градиента температур, очень слабо тормозится редкими U -процессами. В результате возникает поток фононов, переносящий тепло. В качестве примера в [37] рассматривается перенос тепла вдоль стержня малого диаметра d . Если длина свободного пробега относительно N -процессов l_N значительно меньше диаметра стержня $l_N \ll d$, а длина свободного пробега относительно всех возможных процессов торможения фононов $l_R \gg d$, то реализуется режим сплошного течения фононов вдоль стержня. Ситуация напоминает пузелейлевское течение газа в трубке.

Впервые в [37] на основе качественных оценок было обнаружено важное свойство недиффузионного переноса тепла – зависимость k_{eff} от размера образца. Простая качественная оценка показала, что это степенная зависимость

$$\kappa_{eff} = AL^\beta \quad (\beta > 0), \quad (1.3)$$

где L – размер образца. Экспериментально этот результат впервые был получен в работе [38]. В настоящее время эта особенность подтверждена в большом количестве теоретических, численных и экспериментальных исследований. Современные данные показывают, что величина β не является постоянной, а зависит от L , то есть зависимость (1.3) имеет более сложный характер, чем степенная функция.

Следующие две работы посвящены более подробному решению уравнения Больцмана для фононного газа в идеальном кристалле в двух предельных случаях, когда доминируют N -процессы и U -процессы [39,40]. Показано, что в первом случае реализуется совместный (диффузионный и гидродинамический) режим переноса тепла, во втором случае – чисто диффузионный. Для гидродинамического режима получена система уравнений, включающая уравнения сохранения энергии и импульса системы – система уравнений Гайера–Крумхансла (ГК). Один из примеров решения системы уравнений ГК представляет работа [41]. Подчеркнем, что решение сводится к определению эффективной теплопроводности.

Наконец, необходимо указать, что весьма полное представление решений уравнения Больцмана для фононного газа применительно к различным режимам переноса тепла дано в [30]. Результаты этой работы представляют особый интерес, потому что исходными параметрами в них являются параметры фононного газа, отличные от [39,40]. Если в [39,40] в качестве неизвестных величин фигурируют внутренняя энергия фононного газа E и тепловой поток \mathbf{q} , протекающий через материал, то в [30] система уравнений записана относительно температуры T и скорости потока фононов \mathbf{V} . Это более привычно при анализе течения газа.

В последнее время опубликован цикл работ, в которых развита термомассовая модель, имеющая ряд общих черт с гидродинамической моделью [42], но одновременно и отличий от нее. Эта модель исходит из системы уравнений гидродинамики. Обе модели нацелены на изучение продольного варианта распространения тепла и хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

Серьезную конкуренцию гидродинамической модели составляет кинетическая модель [43–47]. Она представляет собой модифицированный вариант решения уравнения Больцмана для макроскопических объектов (1.2). Отличие от классической формулы для теплопроводности заключается в том, что учитываются форма и размеры изучаемого объекта и, соответственно, рассеяние на границах и другие возможные типы рассеяния. Классическая модель исходит из того, что среда изотропна, то есть средние длины свободного пробега фононов одинаковы во всех направлениях. Кинетическая модель для наноструктур учитывает их реальные размеры, а потому в разных направлениях средние длины пробега различны.

Кинетическая модель переноса тепла поперек тонкой пленки впервые была предложена в [48]. В ней используется уравнение Больцмана, учитывающее одновременно диффузионный и баллистический перенос тепла.

Экспериментальные и численные исследования в основном подтверждают предсказания теории. Зависимость эффективной теплопроводности κ_{eff} от l_{∞}/L и κ_{∞} имеет приблизительно следующий вид: $\kappa_{\text{eff}} = \kappa_{\infty}L / (L + l)$ [49]. Результаты этих исследований обычно представляются в виде степенных зависимостей теплопроводности κ_{eff} от размеров L нано- и микроструктур на отдельных интервалах длин образцов (1.3). Однако во всем интервале от бесконечно малого размера до размера, где устанавливается диффузионный механизм переноса тепла, соответствующий макроскопическим образцам ($\beta = 0$), зависимость (1.3) представляет собой кривую, показатель степени β которой изменяется с размером, и, наконец, выходит на нулевое значение. Такие зависимости получаются и в экспериментах, и в численных расчетах [31,33,42,50,51].

Таким образом, при постепенном росте размера образца от величины, значительно меньшей, чем средняя длина свободного пробега фононов, когда основным является недиффузионный режим теплопроводности, до размеров, существенно превышающих длину свободного пробега, когда устанавливается классический диффузионный механизм переноса тепла, происходит увеличение эффективной теплопроводности образца вплоть до значений κ_{∞} , характерных для

больших трехмерных образцов. В ходе увеличения размера перенос тепла одновременно обеспечивают оба указанных выше механизма – диффузионный и баллистический. Вклад каждого в перенос тепла меняется с ростом размера образца до тех пор, пока не установится единственный, диффузионный механизм.

Следующий метод - метод молекулярной динамики, построенный на изучении динамики решетки твердого тела и составлении системы уравнений Ньютона для всех атомов решетки. Однако этот метод имеет два существенных недостатка. Первый – высокая трудоемкость, из-за чего трудно получить результаты для достаточно больших образцов, однако второй и главный недостаток метода в том, что решетка описывается с помощью классической механики, в то время как вся теоретическая база термодинамики и теплопереноса в твердых телах основана на квантовой статистике Бозе–Эйнштейна. Второй – использование метода молекулярной динамики (МД) ограничено областью относительно высоких температур, больше температуры Дебая для соответствующего материала. Известно, что для большинства веществ температура Дебая меньше или немного больше 300 К, а для углерода ~2000К. Поэтому использование МД и классического приближения может приводить к ошибкам при оценке теплопроводности [51–53].

Весьма эффективным для исследования теплопроводности наноструктур является приближение неравновесной функции Грина. Этот метод для неравновесных ферми-систем был развит Л.В. Келдышем [54], а затем для фононного газа – в работах [55,56]. Метод позволяет получить точное решение из первых принципов с учетом квантово-механической природы фононного газа. В ряде работ для расчетов теплопроводности наноструктур используется метод Монте-Карло [57–59].

Отдельно отметим ряд зарекомендовавших себя пакетов программ, разработанных различными научными коллективами для расчета электронных, теплофизических, упругих и пр. свойств материалов. Во-первых, Quantum ESPRESSO [60] (акроним от open Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization) – широкий набор кодов для расчета свойств электронных структур и состояний, в основе которого лежит теория функционалов

плотности (density function theory, DFT). Во-вторых, ShengBTE [55] для расчета решеточной теплопроводности кристаллических материалов и нанонитей, основанный на итерационном решении транспортного уравнения Больцмана. В-третьих, almoBTE [61] для решения транспортного уравнения Больцмана из первых принципов (*ab initio*) и определения теплопроводности, эффективной теплопроводности и температурных полей в кристаллах, сплавах, тонких пленках, сверхрешетках с пространственным масштабом микро-нано.

Приведем ряд примеров. Так в статье [62] проводится расчет эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки из первых принципов (*ab initio*), основанного на прямом расчете столкновительного оператора в уравнении Больцмана для фононов. Вопросами расчета эффективной теплопроводности различных наноструктур из первых принципов занимаются различные научные группы: группа Минго [51], Чэн и Мажумдар – нанопленки [63,64].

Необходимо сказать, что существует большое разнообразие наноструктур, анализ процессов переноса тепла в которых может существенно отличаться от рассмотренных выше примеров. Такими структурами являются сверхрешетки и другие типы многослойных структур. Также своеобразные подходы используются для исследования переноса тепла в таких объектах, как графен, силицен и тесно связанные с ними наноленты и др. Поэтому далее сконцентрируем внимание именно на методах расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок.

1.3. Эффективная теплопроводность нанопленок

В основе расчета эффективной теплопроводности лежит расчет длины пробега фононов между последовательными взаимодействиями со стенкой. Важно отметить, что теплопроводность нанопленок в продольном и поперечном направлениях различны. Различны и механизмы переноса тепла. В условиях продольного переноса тепла основная причина торможения переноса тепла связана с рассеянием фононов на границах. Естественно, что с ростом толщины пленки увеличивается теплопроводность. В условиях поперечного переноса

теплопроводность растёт также с толщиной пленки, так как увеличивается средняя длина свободного пробега.

Одни из наиболее известных экспериментальных работ по определению эффективной теплопроводности вдоль пленок кремния являются работы [65,66], а также [67], в которых представлены результаты проведения эксперимента и последующей обработки экспериментальных данных; а также результаты расчетов продольной теплопроводности в зависимости от температуры. Уменьшение теплопроводности пленок объясняется влиянием фононных взаимодействий с границами. Это приводит к уменьшению среднего свободного пробега фононов. Например, теплопроводность объемного кремния при комнатной температуре (300 К) составляет 146 Вт/(м·К), а для пленки толщиной 10 нм на порядок меньше – 13 Вт/(м·К).

1.3.1. Модели расчета продольной теплопроводности

Подход Казимира-Займана

Как отмечалось выше, интенсивность рассеяния на границах образца τ_b^{-1} становится определяющей в наноматериалах. Феноменологическая модель позволяет представить рассеяние на границах как комбинацию диффузного и зеркального отражений [68]. Учет процессов рассеяния фононов на границе образца является наиболее слабым местом существующих теорий, особенно при расчете теплопроводности микро- и наноструктур.

Диффузное отражение — это отражение потока, падающего на поверхность, при котором отражение происходит под углом, отличающимся от падающего. Диффузным отражение становится в том случае, если неровности поверхности имеют порядок длины волны (или превышают её) и расположены беспорядочно.

В приближении полного диффузного отражения (известного как предел Казимира) время релаксации в подавляющем большинстве работ определяется согласно соотношению Казимира-Займана [69,70]:

$$\tau_b = \frac{l_b}{v}, \quad l_b = Lb_s \quad (1.4)$$

где l_b – средняя длина свободного пробега фононов при взаимодействии со стенками образца; v – скорость фононов; L – характерная длина (к примеру, диаметр для стержней для теплопроводности вдоль осевого направления), b_s – форм-фактор (shape factor), расчет которого аналогичен форм-фактору для излучения [69].

Ранее подход (1.4) был достаточно широко распространен для учета рассеяния на границе образца, в том числе для расчета нанонитей [43,71,72] и пр. структур. Однако, на практике, рассеяние определяется качеством поверхности: её структурой и шероховатостью. Поэтому реальные свойства поверхности, согласно феноменологической модели [57,68], учитываются в эффективной толщине образца L_e

$$L_e = L \frac{1-p}{1+p}, \quad (1.5)$$

где p – параметр зеркального отражения. Параметр p учитывает вероятность того, что фонон при взаимодействии с реальной (шероховатой) поверхностью рассеется зеркально. Для пленки $L = 2 / \pi^{1/2} (a \times b)^{1/2}$, где $a \times b$ – поперечное сечение образца.

Степенные зависимости

Следующая группа методов для учета размерного эффекта строится на оценке длины пробега баллистических фононов в зависимости от числа Кнудсена и представляют собой степенные зависимости, которые впервые были получены Гуржи в 1968 г. [37].

В относительно простом случае тонких пленок влияние размера можно оценить, учитывая, что классическая теплопроводность пропорциональна длине свободного пробега. Тогда, например, при выполнении условия $\text{Kn} \gg 1$, можно принять, что $l \cong L$. Получаем в результате $\kappa_{\text{eff}} / \kappa_{\infty} \cong \text{Kn}^{-1}$. В настоящее время существует несколько таких простых соотношений, относящихся к разным областям определения Kn [49]. Однако в них не учитывается направление распространения тепла. Но надо иметь в виду, что теплопроводность нанопленки

фиксированной толщины заметно отличается при протекании тепла вдоль и поперек пленки [33]. Поэтому использование такого рода оценок дает весьма грубые результаты.

В работе [41] используется система уравнений Гайера-Крумхансла (ГК) для анализа продольной теплопроводности. Полученное решение качественно согласуется с экспериментальными данными ряда авторов. Авторы [75] используют газодинамическое приближение и, соответственно, систему уравнений ГК (15) для определения продольной теплопроводности пленки. В качестве граничного условия на стенке применяется условие, учитывающее скольжение потока фоновго газа на стенке. Работа [33] представляет результаты расчетов продольной и поперечной теплопроводностей кремниевых нанопленок.

Решение уравнения Больцмана

Дальнейшее развитие теории базируется на решении транспортного уравнения Больцмана (1.1). Так в случае продольной теплопроводности функция распределения переносчиков тепла (фононов) близка к равновесной функции Бозе-Эйнштейна. При поперечном переносе тепла функция распределения существенно отличается от равновесной. Поперечный баллистический режим характеризуется тем, что температура внутри пленки постоянна, а на поверхностях возникают скачки температуры [73,74]. В случае диффузионно-баллистического поперечного переноса тепла реализуется примерно линейное распределение температуры, а скачки на поверхностях плёнки уменьшаются с уменьшением числа Кнудсена.

Теплоперенос в тонких пленках с толщиной, сопоставимой с длиной свободного пробега фононов, описывается кинетическим уравнением Больцмана. Оно представляет собой интегро-дифференциальное уравнение в частных производных, описывающее эволюцию во времени функции распределения плотности в фазовом пространстве. Благодаря своей высокой размерности это уравнение в общем виде не имеет аналитического решения. Для описания переноса вдоль тонкой пленки, решение может быть легко получено в предположении, что характерный масштаб длины градиента температур гораздо больше, чем длина свободного пробега фононов. Аналитические решения для электронов получены

Фуксом и Зондхаймером для случая частично зеркального и частично диффузного рассеяния на границах пленок [76,77] и нитей [78,79]. Позже решения Фукса-Зондхаймера были распространены на случай фононного теплопереноса, основываясь на осредненной длине свободного пробега фононов, что позволило произвести расчет теплопроводности в зависимости от толщины пленок и параметра зеркального отражения [68]. За последние десятилетия развитием данного метода занимались многие научные коллективы. Среди которых особенно выделяется группа под руководством Ашеги [65,80–85], Малдован [46,86–88] и др. Отдельно стоит отметить работы по применению подхода Фукса-Зондхаймера для нанонитей [86,89].

Отдельно отметим модель расчета продольной теплопроводности нанонитей в работе [90], где задача разбивается на две области: внутренняя, где определяющими являются процессы взаимодействия фононов друг с другом и неоднородностями решетки, и приповерхностный слой, где определяющими являются процессы рассеяния на границе.

Также представляет интерес подход Прашера и Фелана [91,92], заключающийся в непосредственном рассмотрении состояний фононов в пространстве обратной решетки. При этом в поперечном направлении пленки укладывается конечный набор состояний, а продольное направление условно неограниченно. Поэтому при расчете теплопроводности (1.2) происходит суммирование состояний в поперечном направлении и интегрирование по проекции волнового вектора в продольном. Данный метод особенно полезен при расчете теплоемкости нано- и мезоструктур.

1.3.2. Теплопроводность поперек пленок

Задача изучения теплопроводности поперек тонкой пленки является гораздо более сложной. Для теплопереноса Маджумдар численно решил уравнение Больцмана для фононного транспорта в приближении серого тела с помощью метода дискретных ординат при условии, что обе поверхности пленки являлись абсолютно черными источниками фононного излучения [93]. Позже, Джоши и

Маджумдар разработали уравнение фононного переноса излучения (EPRT) для установившихся и переходных случаев, которое отражало правильное поведение как для чисто баллистического, так и диффузионного режима переноса тепла [94]. Чэн и Тянь использовали решение метода радиационного теплопереноса для расчета теплопроводности тонкой пленкой, закрепленной между двумя источниками тепла [95]. Чэн получил приближенное аналитическое решение уравнения Больцмана для исследования баллистического фононного переноса в поперечном направлении сверхрешеток и обратился к согласованному заданию температур на границах раздела [96]. В рамках применения уравнения фононного излучения (по аналогии с тепловым излучением) в работе [3] проведен расчет эффективной теплопроводности поперек пленки в баллистическом режиме.

Несмотря на представленные достижения в исследовании процессов переноса в тонких пленках на основе кинетического уравнения Больцмана, поиск решения для поперечного переноса по-прежнему доступен только с использованием затратных численных расчетов. Кроме того, большинство предыдущих подходов базируются на однофононной модели пути свободного пробега. Учет дисперсии и анизотропии свойств фононов в описанных численных методах является крайне ресурсоемким.

1.3.3. Анизотропия и дисперсия

Анизотропия свойств нанопленок не вызывает сомнения, однако причины ее появления кроется не только в размерном эффекте, рассеянии фононов на границах и в определяющей роли баллистических фононов. Так в работе [97] рассмотрена эффективная теплопроводность вдоль пленок в зависимости от ориентации кристаллической решетки. В работе установлено, что анизотропия свойств решетки играет существенную роль лишь при температурах во много меньше Дебая (до 70%). При комнатных температурах влияние ориентации решетки на эффективную теплопроводность менее 10%. Более того, в работе [98] для макроскопического образца было установлено, что рассмотрение дисперсии по всем кристаллографическим направлениям по сравнению с квазиизотропным

приближением [100] оказывает влияние на теплопроводность в пределах 5-7% (наихудший результат соответствует низким температурам). С другой стороны, в работе [99] показано, что в рамках квазиизотропного приближения [100] важно рассмотрение дисперсии наиболее близкой к реальному нелинейному закону. В противном случае, это ведет к существенным ошибкам в определении теплопроводности, т.к. модель дисперсии фононов сильно связана с моделью фонон-фононных взаимодействий. Таким образом можно заключить, что в расчетах эффективной теплопроводности (в особенности при температурах порядка температуры Дебая) наиболее целесообразным представляется применение дисперсии в изотропном приближении, при котором сам закон наиболее близок к экспериментальным данным.

1.4. Описание процесса рассеяния фононов на границе

В настоящее время ключевой задачей при исследовании процессов переноса и расчете теплофизических свойств наноструктур является взаимодействие фононов с шероховатыми границами наноструктур является. Это одно из «белых пятен» нанотеплофизики. Сложность этой задачи связана с тем, что границы твёрдых тел представляют собой шероховатые поверхности со случайными распределениями формы.

Как показывают последние экспериментальные данные по анализу свойств наноструктур [1], на эффективную теплопроводность оказывают влияние как среднеквадратичная шероховатость σ (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 σ / 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, $1-p$. В

предельных случаях значение $p = 1$ соответствует зеркальному отражению, $p = 0$ – диффузному отражению (предел Казимира). При заданном значении p каждый фонон претерпевает $1/(1 - p)$ отражений прежде, чем диффузно рассеяться.

Учёт рассеяния на границах строится на модели Казимира-Займана-Соффера [2], а также [68,69], основным результатом которой является формула, устанавливающая связь между параметром p и средней квадратичной шероховатостью σ :

$$p = \exp(-2\sigma^2 k^2 \cos^2 \theta). \quad (1.6)$$

где k – волновое число фонона с длиной волны λ , $k = 2\pi / \lambda$; θ – угол падения волны относительно нормали к средней линии поверхности. Так фононы, для которых $\lambda \gg \delta$, рассеиваются зеркально, а при $\lambda \ll \delta$ – диффузно.

Важно подчеркнуть следующие слабые стороны данного подхода. Во-первых, это выражение применимо лишь для случая нулевой длины корреляции (корреляция отсутствует), $l = 0$; что ставит под сомнение его применимость 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.

Заметим, что в оригинальной работе Соффера [2] выражение (1.6) приводится лишь как один из частных случаев (в приближении Кирхгоффа) некоторой общей задачи рассеяния, которая не решается аналитически. Дальнейшее развитие идей Соффера в случае конечной длины корреляции приводится в работе Мазнева [100]. Однако, в работе Мазнева рассматривается лишь частный случай нормального падения фононов на поверхность, что не позволяет применять эту модель для расчета продольной теплопроводности, когда основополагающими в теплопереносе являются фононы, распространяющиеся преимущественно вдоль

пленки (скользящие фононы). Отдельно обратим внимание на то, что с точки зрения теории распространению упругих волн на границе должен выполняться закон сохранения волнового вектора, который приводит к распаду падающей волны на две (продольную и поперечную), что на данный момент не отражено в моделях. Подробнее с этим случаем можно ознакомиться в работе Огилви [101].

Учет взаимодействия фононов с границами образца является краеугольным камнем в расчете теплопроводности наноструктур. Как можно заключить из приведенного анализа, в настоящее время отсутствует строгий метод расчета рассеяния фононов на границе. Одним из возможных путей решения данной проблемы могут служить подходы, основанные на методе Монте-Карло [10,11].

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. (К примеру, в работе [46].) Во-вторых, это не позволяет применять данный подход для прогнозирования теплофизических свойств наноструктур, таких как эффективная теплопроводность.

1.5. Постановка цели и задач исследования

На основе проведенного анализа сформулированы цель и задачи работы.

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 расчеты 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.

Выводы по главе 1

1. При расчете эффективной теплопроводности пленок необходимо учитывать появление размерного эффекта, а также определяющее влияние свойств поверхности образца (шероховатости) на теплоперенос.

2. Показано, что общим недостатком существующих моделей переноса тепла в наноструктурах является отсутствие учета структуры реальной шероховатой границы. Вместо этого используется однопараметрическая модель, соответствующая случайному распределению высот шероховатостей. При этом, во-первых, влиянием длины корреляции пренебрегают, а вопрос о правомерности такого подхода не ставится. Во-вторых, вопрос о влиянии высот и длин шероховатостей остается открытым; при этом существующие многопараметрические подходы к описанию случайных поверхностей не рассматриваются.

3. В силу статистической природы фононов и реальной шероховатой границы образца представляется целесообразным использовать методы прямого численного моделирования взаимодействия фононов с такой границей твердого тела. При этом существующие методы расчета рассеяния на границе образца рассматривают обе задачи отдельно, связывая их лишь косвенно через параметр зеркального отражения. Как следствие, это затрудняет установление влияния параметров шероховатости (высоты, длины корреляции и пр.) и свойств фононного газа (температура, анизотропия потока фононов и пр.) на теплоперенос в рамках единой модели.

4. 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.

Глава 2. Анализ факторов, влияющих на эффективную теплопроводность

2.1. Дисперсионные кривые кремния

Для определения дисперсионных кривых в настоящее время применяют метод динамики решетки (МДР) [57], который позволяет получить зависимость $\omega(k)$ по главным кристаллографическим направлениям. Метод дает хорошее согласие с результатами эксперимента, но требует значительных вычислительных затрат и определенные навыки владения МДР.

Одной из наиболее простых и широко известных является модель, предложенная в 1963 году Холлендом [102], которая основана на следующих допущениях. Во-первых, реальный закон дисперсии $\omega(k)$ заменяется двулинейной аппроксимацией

$$\omega_{TA} = \begin{cases} v_{T0}k, & \omega < \omega_{T1} \\ v_{TU}k, & \omega_{T1} < \omega < \omega_{TA,max} \end{cases}, \quad \omega_{LA} = \begin{cases} v_Lk, & \omega < \omega_{L1} \\ v_{L1}k, & \omega_{L1} < \omega < \omega_{LA,max} \end{cases}, \quad (2.1)$$

т.е. каждая ветвь (LA и TA) разбивается на два участка, на котором скорость является постоянной.

Современный уровень вычислительной техники позволяет вместо моделей с постоянной скоростью – односкоростной подход Дебая и двулинейная аппроксимация Холленда (2.1) открывает новые пути для построения и учета реальной дисперсии фононов.

В данной работе используется метод аппроксимации экспериментальных данных полиномиальными соотношениями, что позволяет значительно упростить методику расчета. Исходными для аппроксимации являются таблицы экспериментальных данных $\omega(k)$ для кремния и германия [103,104]. В качестве реперных (определяющих) точек используются следующие значения:

$$\begin{cases}
 k_j = 0, \omega_j = 0 \\
 k_j = 0, v_{g,j} = v_{g0,j} \\
 k_j = \pi / a, \omega_j = \omega_{\max,j} \\
 k_j = \pi / (2a), \omega_j = \min(\Delta\omega_{\max,j}) \\
 + k_{TA} = \pi / a, v_{TA} = 0
 \end{cases} \quad (2.2)$$

Таким образом для продольной волны получаем 4 условия и полином 3-ей степени, а для поперечной волны – 5 условий и полином 4-ой степени; аналитическая зависимость для дисперсионного соотношения принимает вид:

$$\omega_j = \sum_{n=0}^{N_j} c_n k^n, \quad (2.3)$$

где $N_{TA} = 3$ и $N_{LA} = 2$. При подстановке выражения (2.2) в систему (2.2) получаем систему линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов c_n полинома. Результаты расчета значений c_n аппроксимационного полинома для дисперсионных соотношений кремния и германия в направлении [100] кристаллической решетки приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Значения коэффициентов аппроксимационного полинома (2.3).

$k, 1/m$	$\omega, 1/c$	$\varpi_j(x) = c_4 x^4 + c_3 x^3 + c_2 x^2 + c_1 x + c_0, \varpi = \omega / 10^{13}, x = k/k_{\max}$				
Коэффициенты для кремния Si		c_0	c_1	c_2	c_3	c_4
j = TA		0	6,759	-3,353	-2,288	1,702
j = LA		0	9,756	-0,371	-1,644	0
j = TO		9,758	0	-5,967	7,837	-2,894
j = LO		9,770	0	-1,220	-8,091	0
Коэффициенты для германия Ge		c_0	c_1	c_2	c_3	c_4
j = TA		0	3,930	-2,705	-0,323	0,612
j = LA		0	5,459	0,052	-0,982	0
j = TO		5,730	0	-4,200	6,240	-2,580
j = LO		5,743	0	-0,496	-0,716	0

На рисунке 2.1 представлены дисперсионные соотношения для кремния вдоль направления [100] кристаллической решетки, которые сопоставлены с экспериментальными данными и двулинейной моделью Холленда.

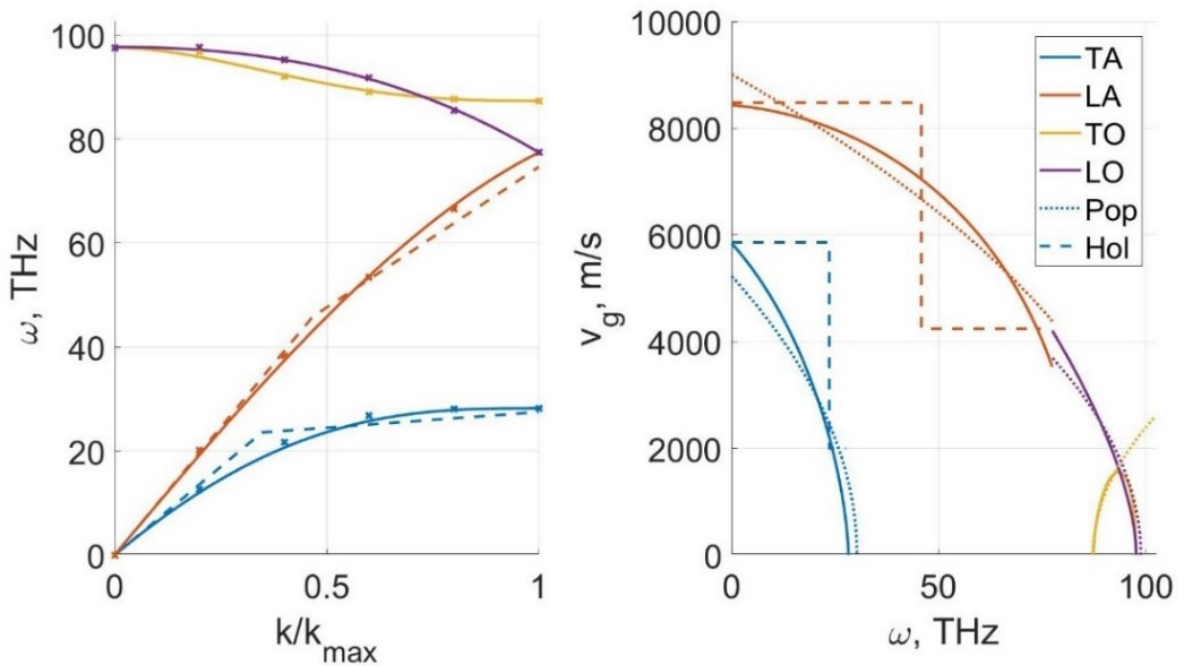


Рисунок 2.1. Дисперсионные кривые и групповые скорости кремния для направления [100]. TA и LA – поперечная и продольная акустические волны, TO и LO – поперечная и продольная оптические волны. Точками указаны экспериментальные данные [103], сплошные линии – аппроксимация авторов (2.3), пунктирные «Hol» – аппроксимация Холленда (2.1), «Pop» – работа [99].

Известны и другие варианты аппроксимационных зависимостей для дисперсии фононов, анализ которых представлен в статье [99]. Отличительной особенностью метода (2.2)-(2.3), предложенного авторами работы, является использование реперных точек не только в центре и на границе зоны Бриллюэна, но и в промежуточной точке, что позволяет учесть поведение реальных дисперсионных кривых внутри зоны Бриллюэна и, как следствие, получить лучшее согласие с экспериментальными данными (см. рис. 2.2).

Отдельный вопрос – учёт оптических мод. По этому поводу существуют противоположные мнения относительно того, насколько велик вклад этих мод в теплопроводность. Например, в работе [105] уверенно заявлено, что ими следует

пренебрегать. Для макроскопических образцов вклад оптических фононов оценивается примерно в 5%, то есть в пределах ошибки. Однако для наноструктур это не так. Причина в том, что при уменьшении размеров образцов средняя длина свободного пробега акустических фононов падает, в то время как длина пробега оптических фононов не меняется из-за её малости. Изменяется соотношение длин пробега и, соответственно, соотношение вкладов акустических и оптических мод в теплопроводность. В работе [106]доказывается со ссылками на других авторов (например, [107], наоборот, большое внимание уделяется влиянию оптических мод на величину теплопроводности, даются ссылки на работы, в которых эти данные подтверждаются. Представлены также результаты определения времён жизни оптических мод. Необходимо ещё иметь в виду работу [108]. (Согласно данным этой работы, вклад оптических мод в теплопроводность наноструктур может достигать 20%!).

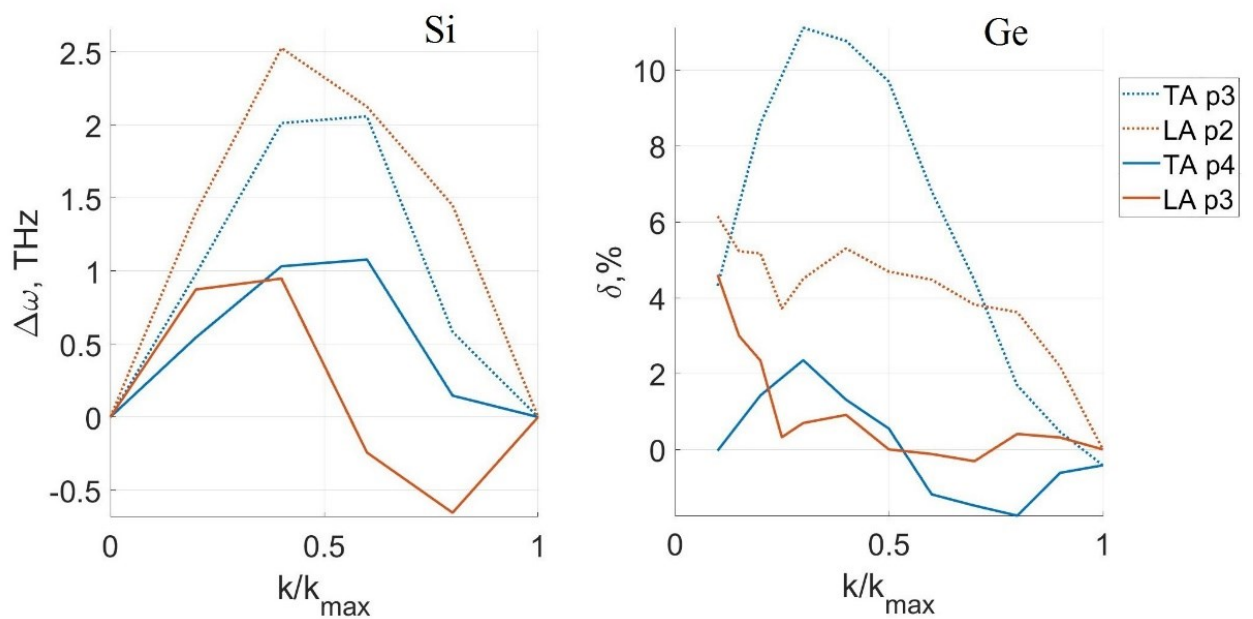


Рисунок 2.2. Погрешность расчета дисперсионных соотношений для кремния и германия в сравнении с экспериментальным данным [103,104]: сплошные линии – модель авторов, пунктирные линии – модели более низкого порядка [99], p соответствует порядку аппроксимационного полинома (2.3).

2.2. Анализ механизмов рассеяния фононов

2.2.1. Механизмы рассеяния фононов

Фононы – кванты упругих волн, распространяющихся в дискретной решётке твёрдых тел. Параметрами этих волн являются частота ω и волновой вектор \vec{k} , определяющий направление распространения волн, по абсолютной величине равный $|\vec{k}| = 2\pi / \lambda$, где λ – длина волны. Данные характеристики связаны друг с другом дисперсионными соотношениями $\omega = \omega(|\vec{k}|)$. В трёхмерных образцах распространяются два типа упругих волн – одна продольная и две поперечные. Энергия и импульс фононов определяются из соотношений де Бройля $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Скорость фонона следует из дисперсионных соотношения и определения групповой скорости $\vec{v} = \partial\omega / \partial\vec{k}$.

В отличие от фотонов фононы не могут иметь частоту больше некоторого значения ω_{\max} . Она различна для разных материалов. Соответственно, вводится величина, характеризующая тепловые свойства материалов: $\theta = \hbar\omega_{\max} / k_B$ – температура Дебая. Величине ω_{\max} соответствует минимальное значение длин волн λ_{\min} и максимальное значение волновых векторов k_{\max} фононов, которые могут существовать в решётке твёрдого тела. В случае одномерной решётки с равновесными расстояниями a между одинаковыми атомами, величины возможных значений k лежат в диапазоне $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$. Это интервал называется первой 3D зоной Бриллюэна. Подобные зоны определяются для 2D и решёток разной геометрии.

В соответствии с решением уравнения Больцмана в приближении времени релаксации, столкновительный оператор сводится к рассмотрению времен релаксации для различных процессов взаимодействия внутри образца. Рассеяние фононов является результатом двух процессов: внутренних – фонон-фононных и фонон-электронных – и внешних – рассеяние на границах и рассеяние, обусловленное несовершенством кристаллической решетки. Так как каждый

процесс рассеяния является независимым, то влияние отдельных механизмов рассеяния может быть учтено с использованием временного приближения, т.е. согласно правилу Матиссена, полное время рассеяния τ определяется как

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph-ph}} + \frac{1}{\tau_{ph-el}} + \frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_b} + \dots, \quad (2.4)$$

где подстрочные индексы соответствуют механизму рассеяния. Схематичное изображение указанных процессов представлено на рисунок 2.3.

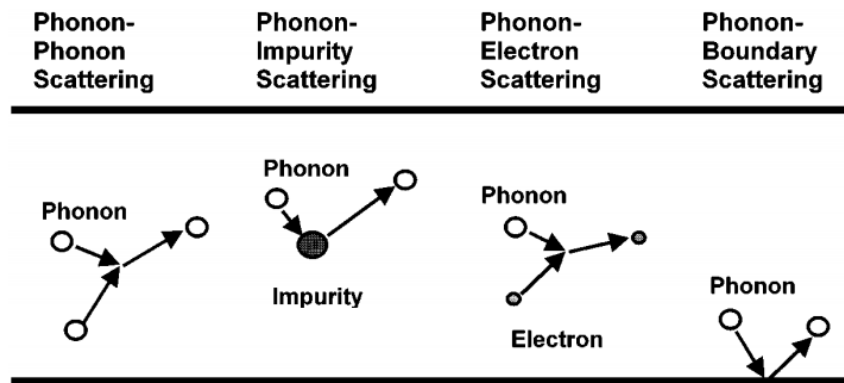


Рисунок 2.3. Схематичное изображение процессов рассеяния в пленке [73].

Рассеянием фононов на электронах τ_{ph-el}^{-1} и электронов на электронах τ_{el-el}^{-1} пренебрегаем, так как рассматриваемый образец является полупроводником/диэлектриком.

2.2.2. Фонон-фононные взаимодействия

Особенности взаимодействий фононов друг с другом заключаются в следующем. Во-первых, основной вклад в теплопроводность вносят взаимодействия с участием трёх фононов. Во-вторых, число частиц в фононном газе изменяется в результате каждого такого взаимодействия. В-третьих, имеют место два типа взаимодействия: N - процессы и U - процессы.

Для N -процессов выполняются следующие уравнения сохранения квазиимпульса (постоянную Планка \hbar опускаем):

$$\vec{k}_1 = \vec{k}_2 + \vec{k}_3, \quad \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3.$$

U -процессы возникают, например, когда сумма $|\vec{k}_1 + \vec{k}_2|$ оказывается больше, чем π/a . В этих случаях уравнения сохранения квазиимпульса имеют вид:

$$\vec{k}_1 = \vec{k}_2 + k_3 + \vec{G}, \quad \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{G}.$$

Величина \vec{G} импульса, передаваемого решётке, определяется из условия сохранения энергии при взаимодействии фононов, и равна $|\vec{G}| = 2\pi/a$. Для всех процессов уравнение сохранения энергии записывается как:

$$\omega_1 = \omega_2 + \omega_3, \quad \omega_1 + \omega_2 = \omega_3.$$

В массивных твердых телах основным механизмом, отвечающим за теплопроводность, являются процессы переброса. (Так как при нормальных процессах полный импульс фононов до и после рассеяния сохраняет тоже направление и абсолютное значение, то данный процесс рассеяния не приносит вклад в теплопроводность.) Закон сохранения квазиимпульса в таких процессах выполняется с точностью до $\hbar\vec{G}$, где \vec{G} – вектор обратной решетки; поэтому они приводят к изменению суммарного импульса фононов. Эти процессы возможны только с участием фононов с достаточно большим волновым вектором (частотой), чтобы сумма волновых векторов взаимодействующих фононов выходила за границы первой зоны Бриллюэна.

Рассмотрим примеры моделей для расчета времен трехфононных взаимодействий.

Модель Холленда [102]. В данном методе выражения для фонон-фононных взаимодействий сводятся к рассмотрению участков, на каждом из которых доминирует свой процесс взаимодействия:

$$\tau_{ph-ph}^{-1} = \begin{cases} \tau_{T,N}^{-1} = B_T \omega T^4, & \omega < \omega_{TA,1/2} \\ \tau_{T,U}^{-1} = B_{TU} \omega^2 / sh(x), & \omega_{TA,1/2} < \omega < \omega_{TA,max} \\ \tau_L^{-1} = B_L \omega^2 T^3, & 0 < \omega < \omega_{LA,max} \end{cases} \quad (2.5)$$

При этом коэффициенты B_T , B_{TU} и B_L в выражении (5) используются для подгонки значения теплопроводности (2) под экспериментальные данные. Более того, при использовании вместо двулинейной аппроксимации (4) иных зависимостей $\omega(k)$ значение теплопроводности сильно отличается от оригинального (в несколько раз), см. статью [99]. Это свидетельствует о том, что времена фонон-фононных взаимодействий (2.5) не отражают реального процесса рассеяния, а лишь служат для подгонки под экспериментальные данные и не могут быть использованы вне рамок первоначальной модели.

Модель Слэка. Аналогичная ситуация обстоит с моделью Слэка [109,110], в основе которой лежит замена реальных законов дисперсии на линейные (с постоянной скоростью), а учет фонон-фононных взаимодействий складывается из двух: процессов переброса по соотношениям

$$\tau_{ph-ph}^{-1} = \begin{cases} \tau_{T,U}^{-1} = B_{TU} \omega^2 T \exp(-\theta_T / 3T) \\ \tau_{L,U}^{-1} = B_{LU} \omega^2 T \exp(-\theta_L / 3T) \end{cases} \quad (2.6)$$

и нормальных процессов, которые в работе [110] совпадают с выражениями из модели Холленда [102]. При этом в коэффициенты B_{TU} , B_{LU} (и аналогичные B_{TN} , B_{LN}) заложена возможность для подстройки получаемого решения под экспериментальные данные за счет варьирования параметров Грюнайзена для поперечной и продольной поляризаций.

При этом отметим, что в соотношениях (2.6) частота рассеяния τ_{ph-ph}^{-1} , обусловленная процессами переброса, при высоких температурах пропорциональна квадрату частоты. А экспоненциальный множитель вводится для ограничения влияния процессов переброса при низких температурах. Поэтому окончательное выражение для рассеяния, обусловленное процессами переброса

$$\tau_U^{-1} = A \omega^2 T \exp(-\theta_D / bT) \quad (2.7)$$

где $A = 2\gamma^2 k_B / (\mu V_0 \omega_D)$ – коэффициент, зависящий от свойств и структуру материала; γ – параметр Грюнейзена, μ – модуль упругости II рода; V_0 – объем,

приходящийся на один атом; ω_D – частота Дебая. В наноматериалах плотность состояний и дисперсионные соотношения зависят от размеров образца, поэтому в представленном выражении для массивного твердого тела должна быть учтена геометрия образца.

Нынешний уровень развития вычислительной техники позволяет использовать современные методы расчета времен фонон-фононных взаимодействий из «первых принципов» [57], которые не содержат подгоночных параметров и лучше отражают «физику» процесса, нежели модели, рассмотренные ранее. В данной работе используются фонон-фононные времена для нормальных и umklapp процессов, которые получены Вордом и Бройдо [98] на основе анализа процессов взаимодействия фононов «из первых принципов»:

$$\tau_{ph-ph,j}^{-1}(\omega, T) = \tau_{N,j}^{-1} + \tau_{U,j}^{-1} = A_j^N \omega^2 T \cdot f(T) + A_j^U \omega^4 T \cdot f(T) \quad (2.8)$$

где $f(T) = 1 - \exp(-3T / \theta_D)$, j – поперечная ТА и продольная LA поляризации. Значения коэффициентов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Коэффициенты для времен фонон-фононных взаимодействий [98].

	A_{TA}^N (мэВ ² · К · с) ⁻¹	A_{LA}^N (мэВ ² · К · с) ⁻¹	A_{TA}^U (мэВ ⁴ · К · с) ⁻¹	A_{LA}^U (мэВ ⁴ · К · с) ⁻¹	θ_D, K
Si	253 322	163 921	2 012	507	658
G e	460 248	401 980	8 634	1 990	376

Не смотря на явное преимущество выражения (2.8) – отсутствие подгоночных параметров и непосредственную связь с моделированием процессов трехфононных взаимодействий – оно до сих пор не нашло широкого распространения в расчетах.

На рисунке 2.4 представлено сравнение времен фонон-фононных взаимодействий согласно моделям Холленда (2.5), Слэка (2.6) и Ворда-Бройдо (2.8) для кремния при температуре 300К. На графиках видно, что результаты расчета по

трем обозначенным моделям согласуются только при низких частотах и расходятся с ростом энергии фононов; при этом можно заметить, что модель Холленда переоценивает вклад фононов поперечной поляризации.

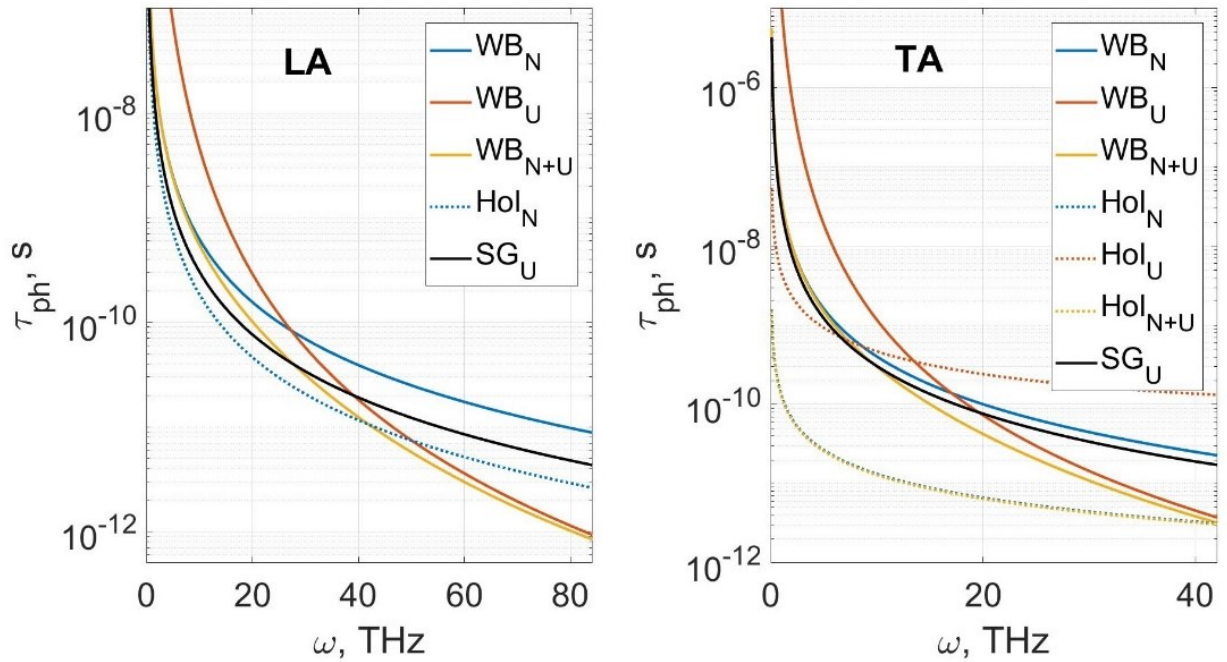


Рисунок 2.4. Времена фонон-фононных взаимодействий: WB – модель Ворта-Бройдо (11), Hol – модель Холленда (5) и SG – Слэка (6); индексы соответствуют типу процесса: N – нормальные процессы, U – процессы переброса.

2.2.3. Рассеяние фононов на примесях кристаллической решетки

До сих пор в подавляющем числе расчетов учет времени рассеяния на примесях, а также процессы рассеяния, обусловленные различием в массе атомов одного и того же химического элемента, т. е. изотопов, строится на соотношении, полученном Клеменсом в 1955 году [111]

$$\tau_{imp}^{-1} = A\omega^4, \quad (2.9)$$

в котором A – константа, зависящая лишь от концентрации примесных атомов, изотопов в материале. При этом считается, что материал изотропный и скорость распространения фононов равна средней по Дебаю $v_S^{-3} = 1/3(v_L^{-3} + 2v_T^{-3})$, где v_L и v_T – скорости распространения упругих волн в макроскопическом образце.

Использование соотношения (2.9) в расчетах теплопроводности предполагает игнорирование реальной дисперсии фононов. А, следовательно, ведет к ошибочным расчетам в областях температур и толщин пленок, где влияние рассеяния на примесях является определяющим. Более строгий анализ процессов рассеяния был проведен Тамурой [112], а выражение выглядит следующим образом:

$$\tau_{imp,j}^{-1} = \frac{\pi}{6} V_0 g \omega^2 D_j(\omega), \quad (2.10)$$

где V_0 – объем кристаллической решетки, приходящийся на один атом; g – параметр, отвечающий за содержание примесных атомов в решетке, $g = \sum_i f_i (\Delta M_i / M)^2$; f_i – концентрация i -ого изотопа, масса которого отличается от средней M на величину ΔM_i .

В работе [112] показано, что расчет по формуле (2.9) дает завышенный в несколько раз результат по сравнению с соотношением (2.10) в области частот, близких к ω_j^{\max} . То есть при температурах порядка и выше температуры Дебая, где велико влияние высокочастотных фононов, значение теплопроводности заведомо завышается. Тем самым искусственно создается необходимость применения подгоночных параметров.

2.2.4. Расчет времени свободного пробега

Для определения вклада каждого из процессов рассеяния (2.5)–(1.4) в полное время рассеяния, определяемое по правилу Маттиссена (2.4), построим графики (рисунок 2.5) каждой составляющей в характерном для кремния диапазоне частот. По графику видно, что процессы переброса τ_U^{-1} играют незначительную роль в процессах рассеяния при температурах ниже температуры Дебая.

В тонкой пленке в широком диапазоне частот (для фононов с длинами волн, превосходящих постоянную решетки) решающее значение имеют процессы рассеяния на границах τ_b^{-1} , и лишь на небольшом участке спектра (для фононов,

длина волны которых сопоставима с постоянной решетки) Umklapp-процессы будут происходить чаще, чем рассеяние на границах.

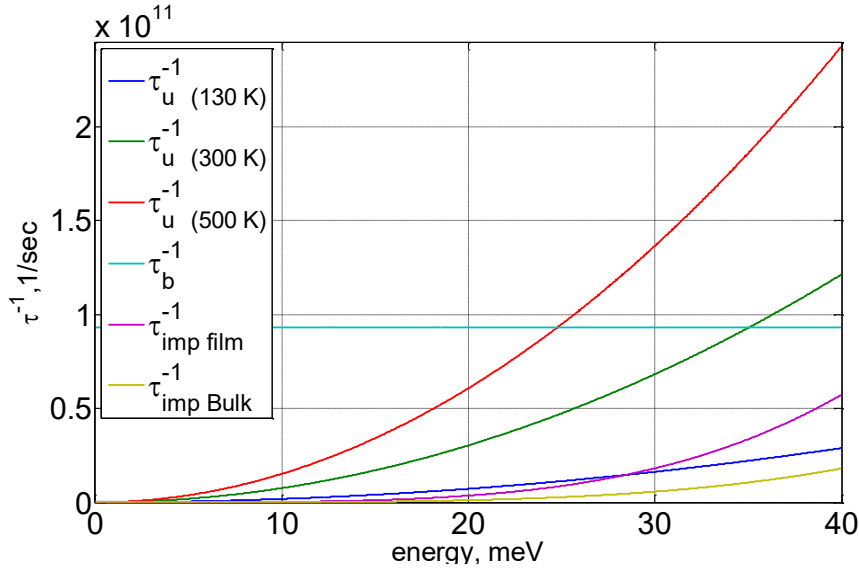


Рисунок 2.5. Процессы рассеяния для тонкой пленки Si и массивного образца.

2.3. Анализ характерных размеров (факторов), влияющих на перенос в наноструктурах

2.3.1. Оценка длины свободного пробега фононов в макроскопическом образце и режима теплопереноса

Как было показано ранее, режим теплопереноса может быть оценен с помощью числа Кнудсена $Kn = l_{\infty} / l_{хар}$. При этом необходимо принять во внимание, что длина свободного пробега фонона l_{∞} зависит от температуры, энергии фонона и его поляризации, а $l_{хар}$ – от направления теплового потока, то есть задача является многопараметрической. С целью минимизировать количество определяющих факторов оценим среднюю длину свободного пробега через уравнение для теплопроводности, полученное на основе решения транспортного уравнения Больцмана в приближении времени релаксации и данных о динамике решетки (дисперсионные кривые и времена свободного пробега фононов).

$$k_{bulk}(T) = \frac{1}{3} \sum_j \int_{\omega_{min,j}}^{\omega_{max,j}} \hbar \omega \frac{df_0(\omega, T)}{dT} D_j(\omega) v_{g,j}(\omega) l_j(\omega, T) d\omega \quad (2.11)$$

где j – поляризация волны фононов ($j=1$ соответствует поперечной ТА волне, а $j=2$ – продольной LA) f_0 – равновесная функция Бозе-Эйнштейна; D_j – функция плотности состояний фононов с поляризацией j ; $v_{g,j}$ – групповая скорость фононов; l_j – длина свободного пробега фононов, которая определяется согласно правилу Маттиссена, как результирующая между всеми процессами взаимодействия:

$$l^{-1}(j, \omega, T) = l_{ph-ph}^{-1}(j, \omega, T) + l_{imp}^{-1}(j) + l_{bound}^{-1}(j, \omega). \quad (2.12)$$

Здесь l_{ph-ph} – длина пробега между фонон-фононными взаимодействиями, определяемое, к примеру, по подходу [98] (рис. 2.6); l_{imp} – длина пробега между последовательными взаимодействиями фононов с неоднородностями решетки (примесные атомы и пр.); l_{bound} – длина пробега фонона между последовательными взаимодействиями с границей образца, которая приближенно может быть оценена как характерный размер образца $l_{bound} \approx l_{xap}$.

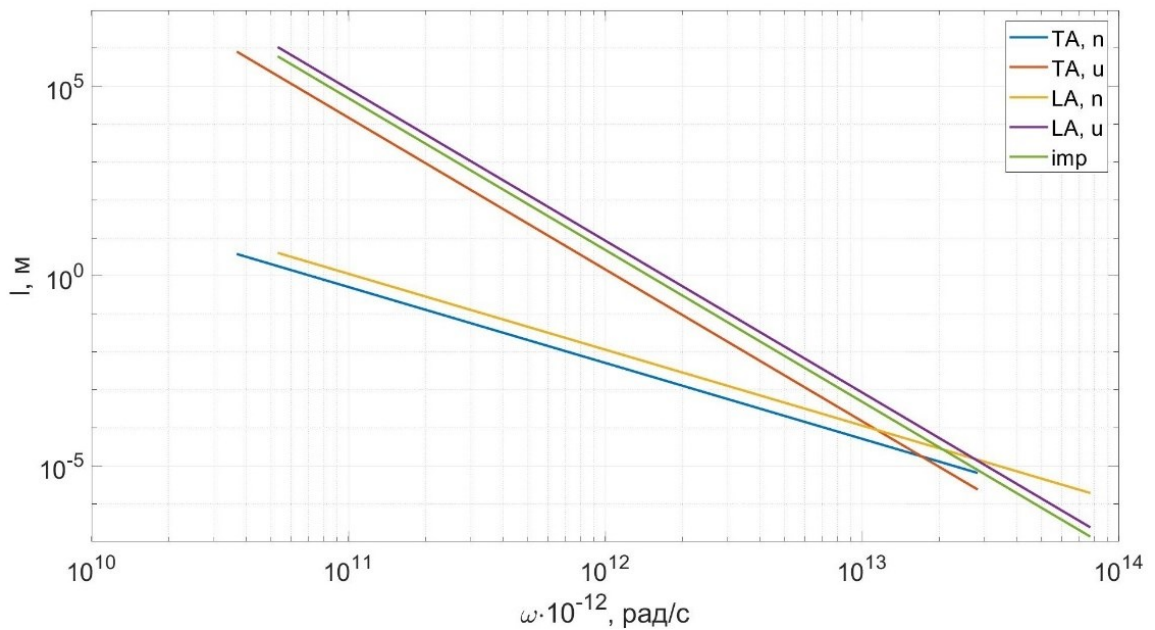


Рисунок 2.6. Длина свободного пробега кремния для различных процессов взаимодействия. 1) фонон-фононные процессы: нормальные (n) и с перебором (u) для продольной (LA) и поперечной (ТА) поляризаций; 2) взаимодействие фононов с примесями (imp).

Данный подход позволяет вместо рассмотрения $l(j, \omega, T)$ оценить среднюю длину свободного пробега $\bar{l}_\infty(T)$ в зависимости от температуры:

$$\bar{l}_\infty(T) = \frac{\sum_j \int_{\omega_{\min,j}}^{\omega_{\max,j}} \hbar \omega \frac{df_0(\omega, T)}{dT} D_j(\omega) v_{g,j}(\omega) l_j(\omega, T) d\omega}{\sum_j \int_{\omega_{\min,j}}^{\omega_{\max,j}} \hbar \omega \frac{df_0(\omega, T)}{dT} D_j(\omega) v_{g,j}(\omega) d\omega}. \quad (2.13)$$

Для иллюстрации различных режимов теплопереноса на основе выражения (1.2) сформулирован метод оценки режима теплопереноса по числу Кнудсена. В качестве примера выполнен расчет для кремния и получена диаграмма (рис. 2.7), которая позволяет оценить режим теплопереноса в зависимости от величины характерного размера образца, $l_{\text{хар}}$, и температуры, T .

$$Kn = Kn(T, l_{\text{хар}}) = \frac{\bar{l}_\infty(T)}{l_{\text{хар}}}. \quad (2.14)$$

Результаты проведенных расчетов для кремния проиллюстрированы на рисунке 2.7.

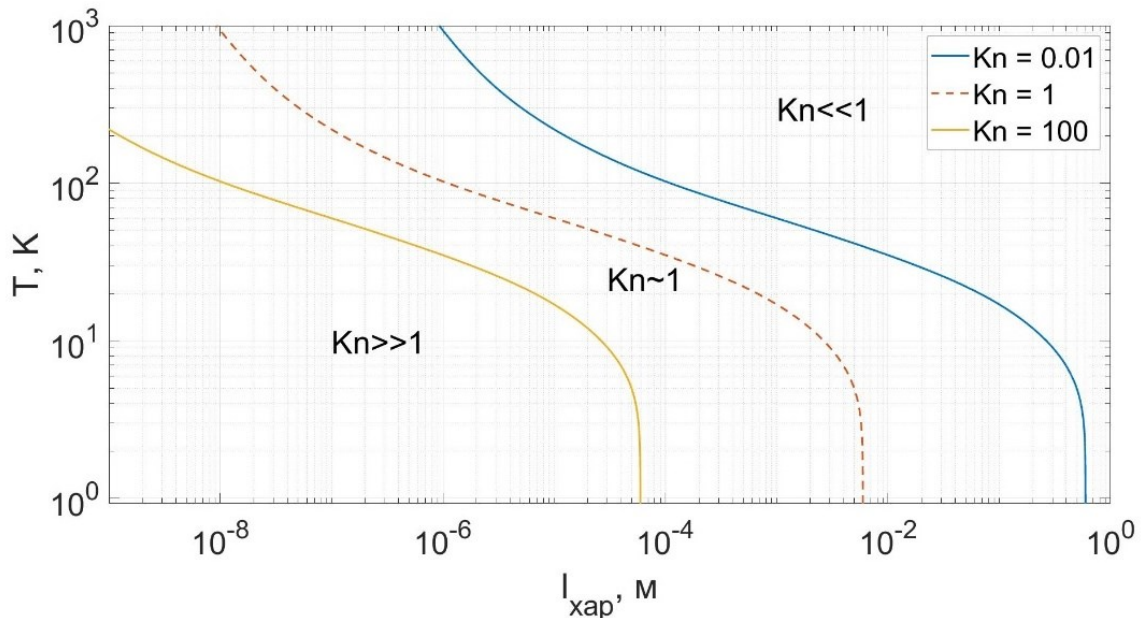


Рисунок 2.7. Оценка режима теплопереноса для кремния:
 $Kn \ll 1$ – диффузионный; $Kn \sim 1$ – диффузионно-баллистический;
 $Kn \gg 1$ – баллистический режим.

Полученная диаграмма (рисунок 2.7) полезна на практике, так как открывает пути воздействия на режим теплопереноса для создания структур с необходимыми свойствами. Видно, что влияние границ имеет место не только в структурах микро- и наномасштаба (размерный эффект), но и в структурах с характерным размером $\bar{l}_\infty \sim 1\text{мм}$ при $T \sim 50\text{К}$ и ниже.

2.3.2. Оценка длины волны фонона

Длина волны фонона, которая может быть представлена в следующей форме:

$$\lambda_{ph} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\omega} v_{ph}(\omega). \quad (5)$$

Откуда можно заключить, что длина волны фонона является функцией его частоты (энергии) и фазовой скорости фонона. Среди методов оценки длины волны фононов выделим следующие:

1. используя скорости, полученные из аппроксимации экспериментальных данных;
2. используя модель с постоянной скоростью (Дебай);
3. согласно выражению для тепловых фононов $\lambda_{mp} \approx a \frac{\theta_D}{T}$;

Необходимо отметить, что в соответствии с уравнением для теплопроводности (2.11) фононы разных частот в зависимости от рассматриваемой температуры вносят разный вклад в теплоперенос (теплопроводность). Поэтому возникает задача оценки вклада фононов с разной длиной волны в теплоперенос в зависимости от температуры. Для этого воспользуемся выражением (2.11) с переменным верхним пределом [113]:

$$\delta(T, \lambda) = \frac{1}{k_{bulk,j}} \int_{\omega_{min,j}}^{\omega(\lambda)} \hbar \omega \frac{df_0(\omega, T)}{dT} D_j(\omega) v_{g,j}(\omega) l_j(\omega, T) d\omega. \quad (2.15)$$

Результаты расчета для кремния приведены на рисунке 2.8.

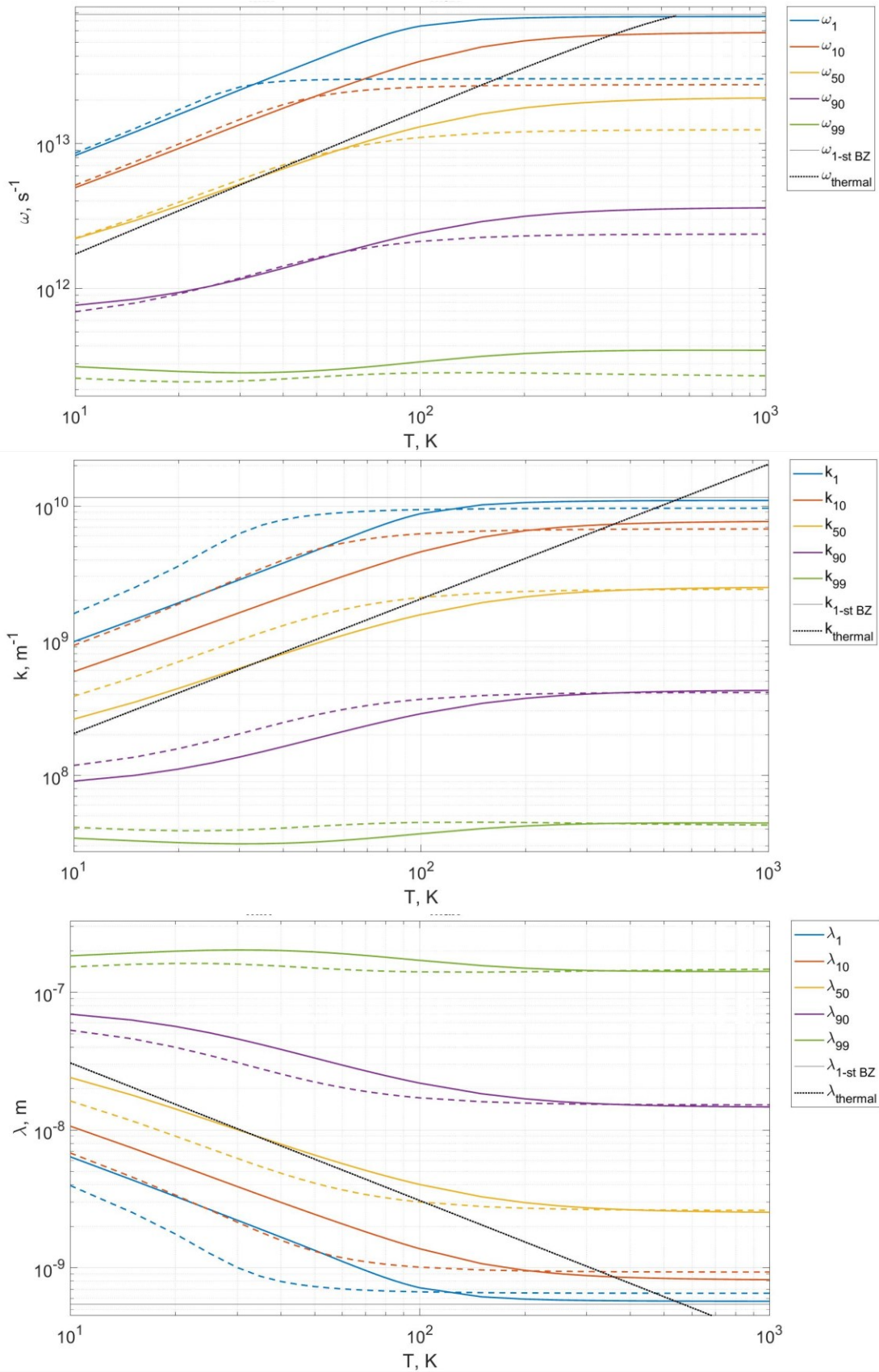


Рисунок 2.8. Кумулятивный вклад в теплопроводность (2.15).

Также проведем расчет λ_{kWB} на основе поиска частоты, оказывающей наибольшей вклад в теплопроводность, рассчитанной с использованием времени релаксации по Ward-Broido. Результаты расчета представлены на рисунке 2.9.

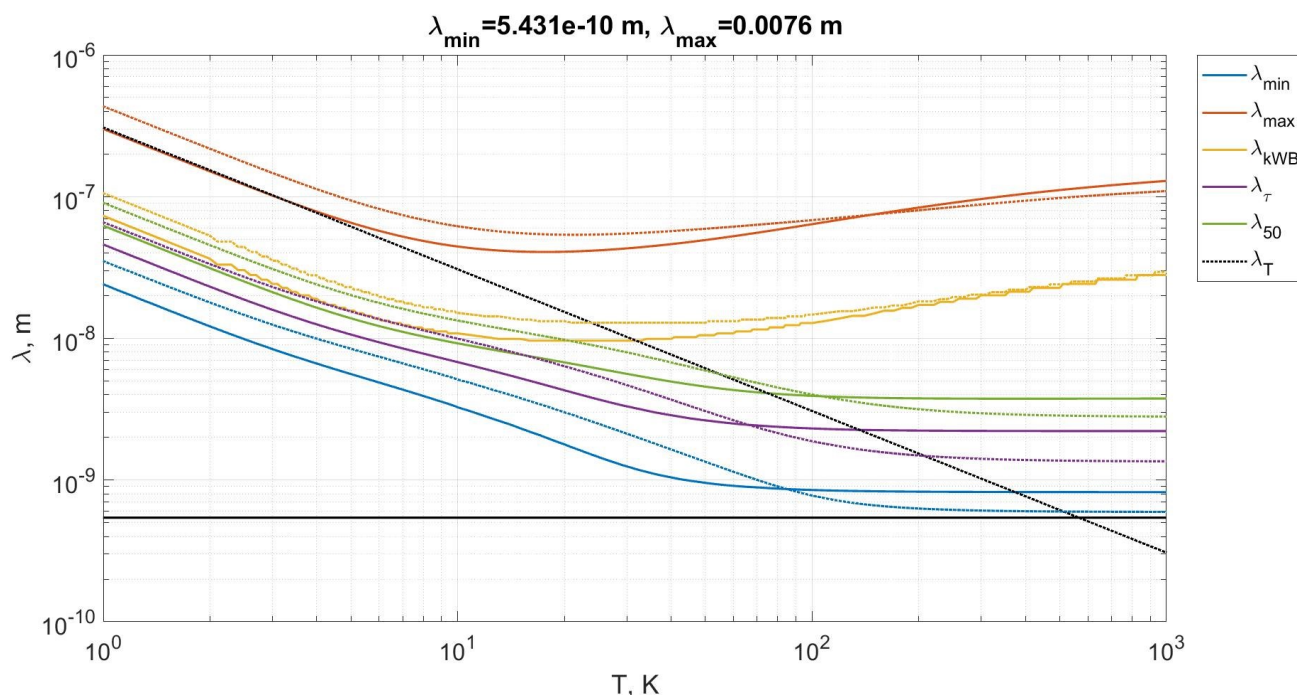


Рисунок 2.9. Зависимость средних длин волн фононов от температуры: $\lambda_{\min} = \lambda_{1\%}$ и $\lambda_{\max} = \lambda_{99\%}$ – верхняя граница длин волн фононов, вносящих соответственно 1% и 99 % в теплопроводность, λ_{50} – значение длин волн, вносящих 50% в теплопроводность. Сплошные линии соответствуют поперечным волнам (TA), пунктирные – продольной поляризации (LA).

2.4. Установление влияния параметра зеркального отражения на эффективную теплопроводность пленок

Как отмечалось ранее, параметр зеркального отражения, используемый для описания отражения от шероховатой поверхности, используется в качестве подгоночного для достижения наилучшего согласия с экспериментальными данными. Для иллюстрации существенного влияния параметра p на эффективную теплопроводность пленок сформулируем модель, в которой он будет являться единственной неопределенной величиной.

Для этого воспользуемся моделью Фукса-Зондхаймера, дополнив её следующими свойствами фононного газа: дисперсионными соотношениями (2.2)-(2.3) и моделью фонон-фононных взаимодействий из первых принципов (2.8). Подробнее об особенностях данной модели можно ознакомиться в работе [12]. На основе проведенных расчетов эффективной теплопроводности пленок кремния (рис. 2.10) 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.

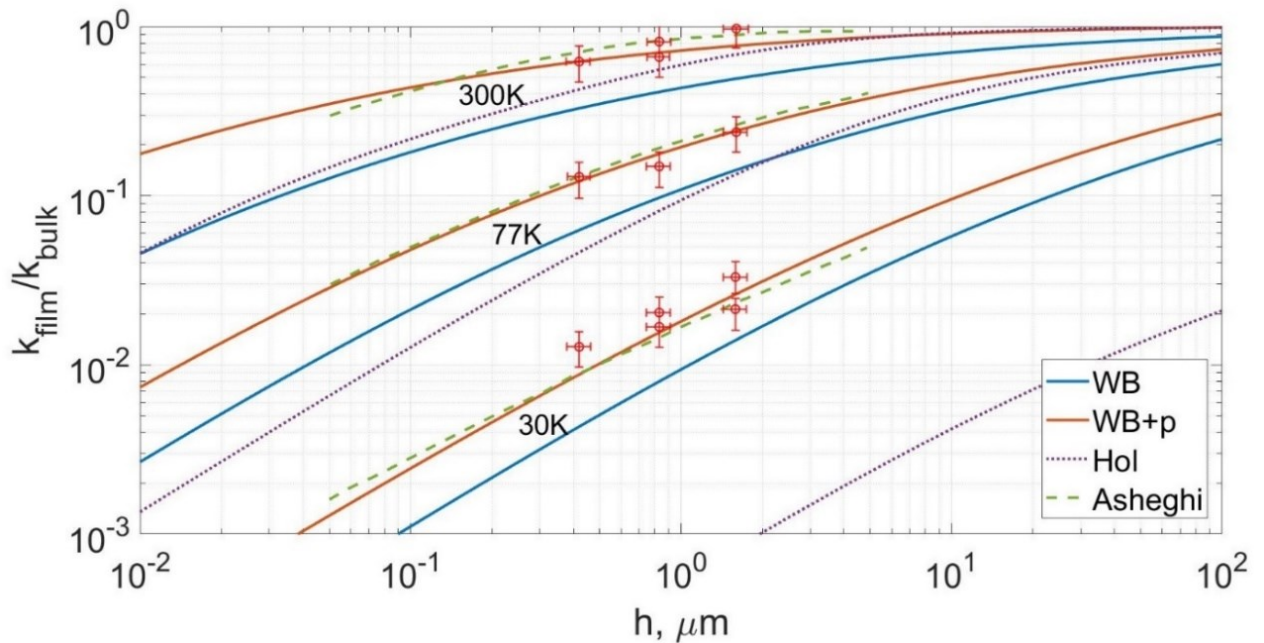


Рисунок 2.10. Эффективная теплопроводность вдоль пленок кремния в диапазоне толщин от 10 нм до 100 мкм: WB – модифицированная модель Фукса-Зондхаймера при условии диффузного отражения ($p=0$); WB+p – та же модель при $p=0.4, 0.5$ и 0.8 для температур $T=30$ К, 70 К и 300 К, соответственно; Hol – модель Холленда при $p=0$. Asheghi – результаты расчета теплопроводности, основанные на модели Фукса-Зондхаймера; точки соответствуют экспериментальным данным [65].

При обращении к детализированному рассмотрению модели фононов в твердом теле необходимо учитывать поляризацию, дисперсию, а также в общем случае зависимость свойств от направления (анизотропию).

Поэтому в общем случае при анализе рассеяния фононов, необходимо учитывать зависимость параметра зеркального отражения от многих факторов $p = p(j, \omega, \theta, \sigma_{rms})$. При этом так как фононы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, то распределение по частотам (энергиям) будет отличаться для разных температур. Поэтому следует учитывать также зависимость p от температуры. Кроме того, геометрия образца, выраженная в наборе характерных размеров, влияет на величину максимальной длины волны фононов, которые могут распространяться в образце, поэтому спектр будет зависеть от характерных размеров образца. Как следствие, от геометрии будет зависеть и p .

Далее приводятся различные подходы к осреднению p с целью создания эффективного инструмента, который позволил бы на практике оценивать величину p в зависимости широкого набора факторов, представленных выше; а также проводить моделирование поверхности образца для достижения желаемых теплофизических свойств перспективных структур нанoeлектроники и нанотеплофизики.

2.4.1. Установление влияния температуры на параметр зеркального отражения

Для установления влияния температуры на коэффициент зеркального отражения проводится осреднение с использованием функции распределения и плотности состояний

$$p = p(j, \omega, \theta) = \exp(-4\zeta^2 \cos^2 \theta),$$

$$\zeta(j, \omega, \sigma_{rms}) = k(j, \omega)\sigma_{rms}, \quad k(j, \omega) = \frac{2\pi}{\lambda_{ph}(j, \omega)} \quad (2.16)$$

Следовательно p является функцией поляризации j , круговой частоты и угла θ между нормалью и возможными углами падения на границу.

Для установления влияния температуры на коэффициент зеркального отражения проводится осреднение с использованием функции распределения и плотности состояний

$$p(T, \sigma_{rms}) = \frac{\int_0^{T/2} \int_{\omega_{min,j}}^{\omega_{max,j}} f_0(\omega, T) D_j(\omega) p(j, \sigma_{rms}, \omega, \theta) d\omega d\theta}{\int_0^{T/2} \int_{\omega_{min,j}}^{\omega_{max,j}} f_0(\omega, T) D_j(\omega) d\omega d\theta} \quad (2.17)$$

Необходимо отметить, что выражение (2.17) основано на использовании функции плотности состояний (DOS), которая включает осредненную по направлениям информацию о динамике кристаллической решетки реального образца.

Результаты расчета для кремния представлены на рис. 2.11 и 2.12.

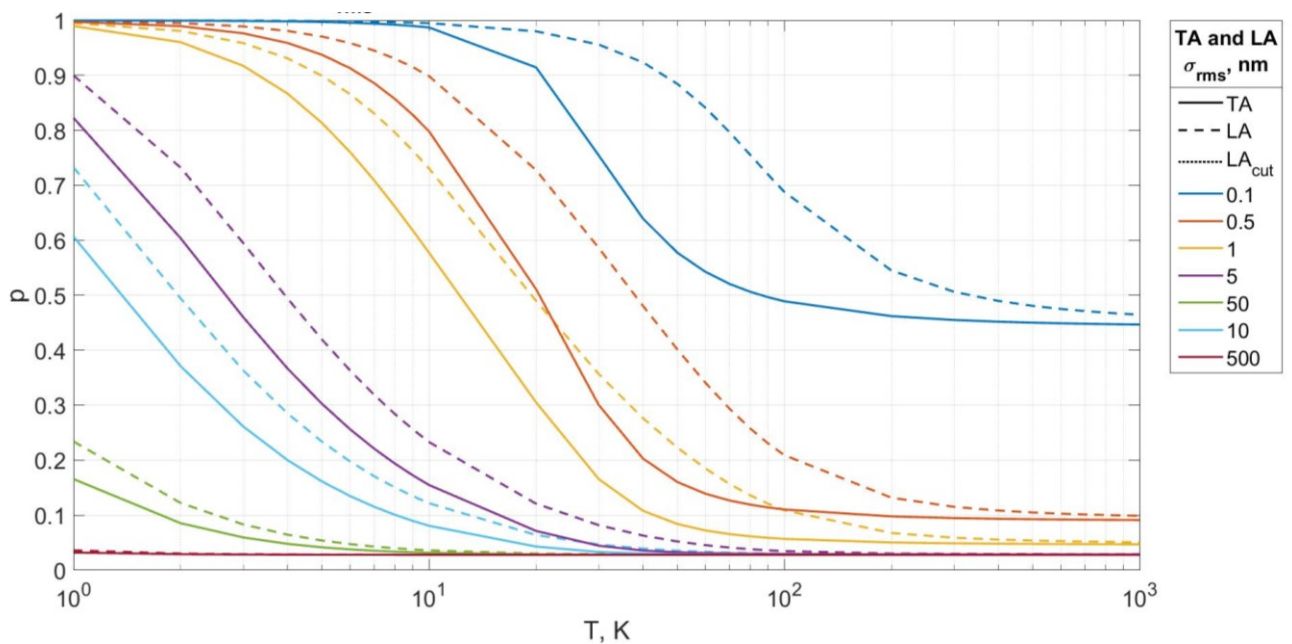


Рисунок 2.11. Расчет по выражению (21) для кремния. Сплошные линии – ТА, пунктирные - ТА

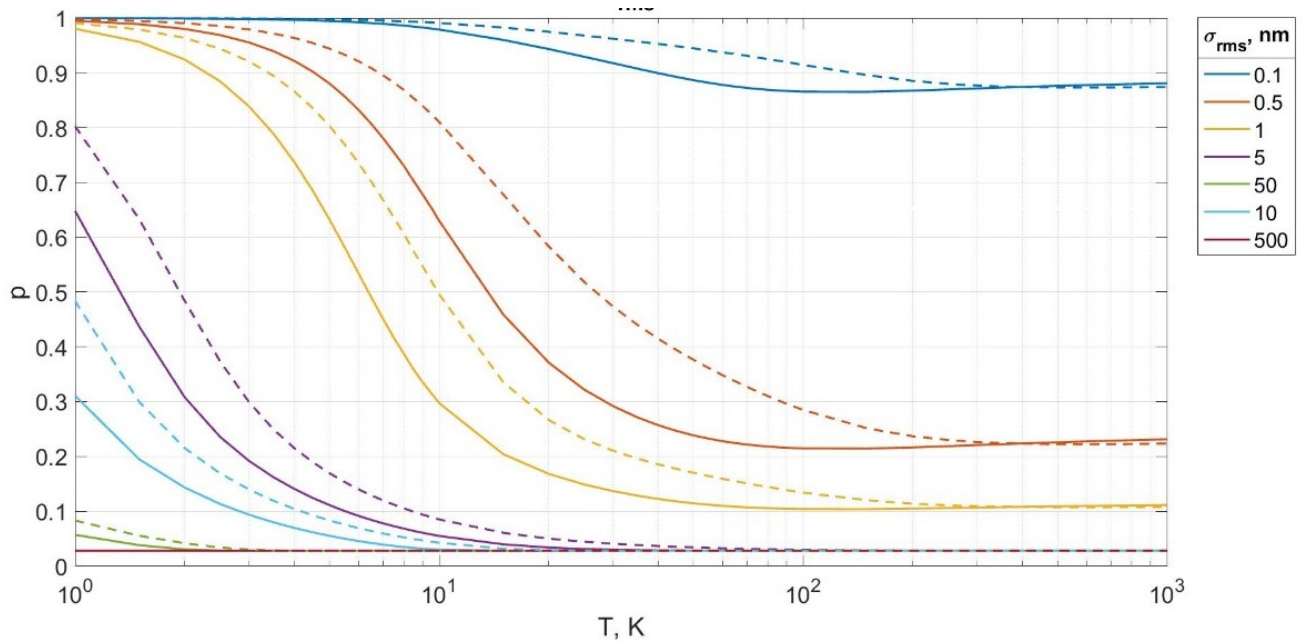


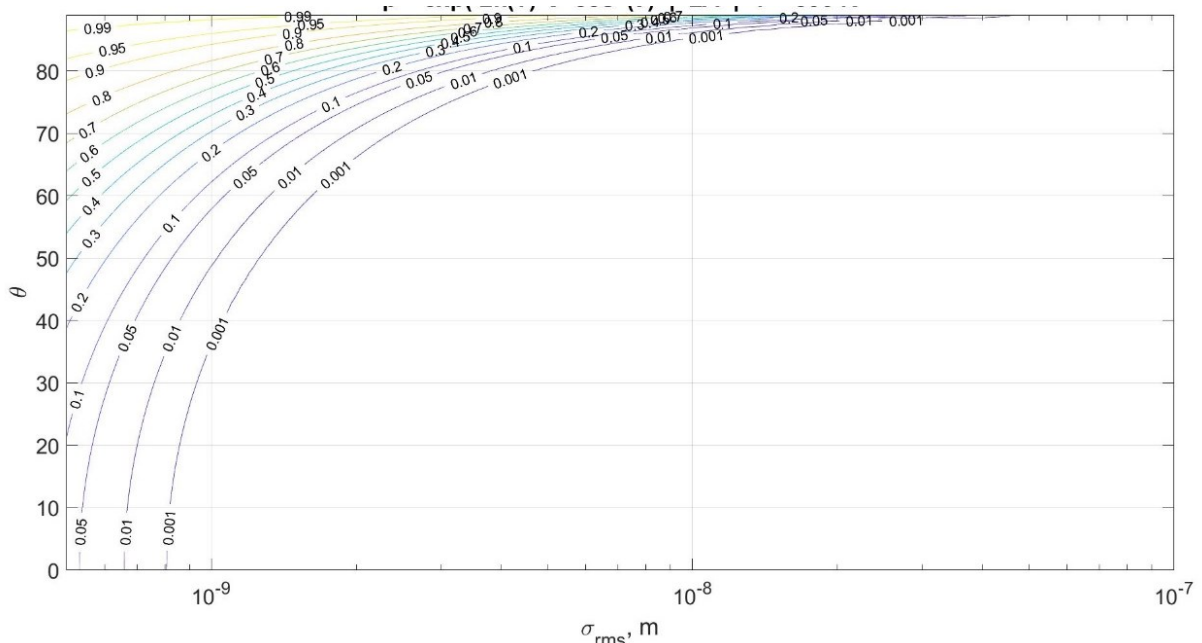
Рисунок 2.12. Расчет с использованием средней длины волны $\bar{\lambda}$ на примере λ_{50} (длин волн фононов, которые вносят 50 % в теплопроводность). Сплошные линии – TA, пунктирные - TA

2.4.2. Влияние толщины на средний угол падения

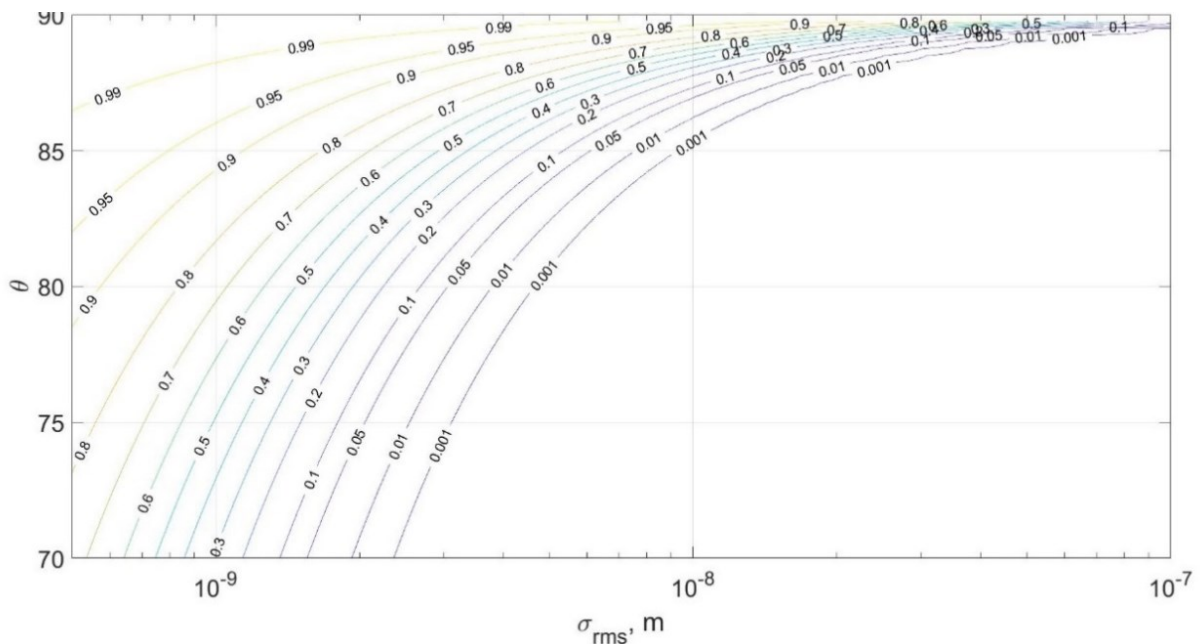
Рассмотрим влияние угла падения упругой волны на процесс рассеяния на шероховатой поверхности. Направление распространения волны задается волновым вектором, который при переходе к скалярным величинам можно определить через волновое число (модуль волнового вектора) и угла падения между нормалью к поверхности и волновым вектором.

Воспользуемся выражением (Ogilvy) для параметра зеркального отражения и проанализируем влияние угла. Так на рис. 2.13 представлена зависимость параметра зеркального отражения от угла падения и среднеквадратичной шероховатости поверхности для температуры 300 К (зависимости справедливы для температур от 100 К и выше). Видно, что наблюдается сильная зависимость p от угла θ : при шероховатостях порядка 10 нм коэффициент p меняется от 0,001 до 1 в диапазоне углов падения от 85 до 90; а для шероховатости 1 нм те же изменения параметра p лежат в диапазоне углов от 35 до 90. Следовательно, при увеличении величины σ_{rms} зона изменения параметра зеркального отражения (от ~ 0.001 до 1)

сужается в область углов, близких к 90. Таким образом, именно «скользящие» волны/фононы оказывают существенное влияние на параметр зеркального отражения.



а



б

Рисунок 2.13. Параметр зеркального отражения для фононов продольной поляризации при температуре 300 К: а) для области углов падения от 0 до 90, б) укрупнена область для углов падения от 70 до 90.

Данное обстоятельство особенно важно при поиске среднего значения \bar{r} . Так в ряде известных моделей используются следующие допущения при осреднении по

углам: (а)– рассматривается некоторый характерный угол, к примеру $\pi/3$ [65], который выполняет роль среднеинтегрального значения при осреднении, (б)– используется равномерное распределение по углам. В таком случае осреднение происходит с использованием соотношения:

$$\bar{p}_j(T, \sigma) = \frac{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} p(k, \theta, \sigma) f_{BE}[\omega_j(k), T] \text{DOS}_k(k) dk d\theta}{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} f_{BE}[\omega_j(k), T] \text{DOS}_k(k) dk d\theta}, \quad (2.18)$$

где f_{BE} – равновесная функция распределения Бозе-Эйнштейна; DOS_k – функция плотности состояний, $\text{DOS}_k(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}$. Результаты расчета (T, σ) для диапазона температур от 0 до 300 К и средней квадратичной шероховатости 0,1 нм, 0.5 нм, 1.5 нм приведены на рис. 2.14 и сравниваются с результатами из работы [47]. Видно, что результаты расчета по соотношению (2.18) отличаются от работы [47] качественно похожи, при этом значения отличаются не более, чем на 20-25%.

Из анализа подходов (а) и (б) можно заключить, что основной вклад при осреднении p вносит **область «средних» углов**. Это обстоятельство на основании рис. 2.14 приводит к значениям параметра зеркального отражения $\bar{p} \ll 1$ (для значений $\sigma > 10$ нм), поэтому рассеяние носит **преимущественно диффузный характер** $\bar{p} \sim 0$. (Обратим внимание, что значения $\bar{p}_j(T, \sigma)$ на рис. 2.14 не находятся в противоречии с данным заключением, т.к. рассматриваются шероховатости $\sigma \sim 1$ нм.)

При переходе к задаче о распространении потока тепла **вдоль** шероховатой поверхности представленные методы осреднения явно недооценивают роли углов падения близких к $\pi/2$. Так в ряде статей по расчету теплопроводности (in-plane) в тонких пленках и нитях при использовании \bar{p} в качестве подгоночного параметра получены значения от 0.1 и выше. Следовательно, возникает задача поиска иного метода осреднения по углам падения, который учитывал бы роль «скользящих» фононов/волн.

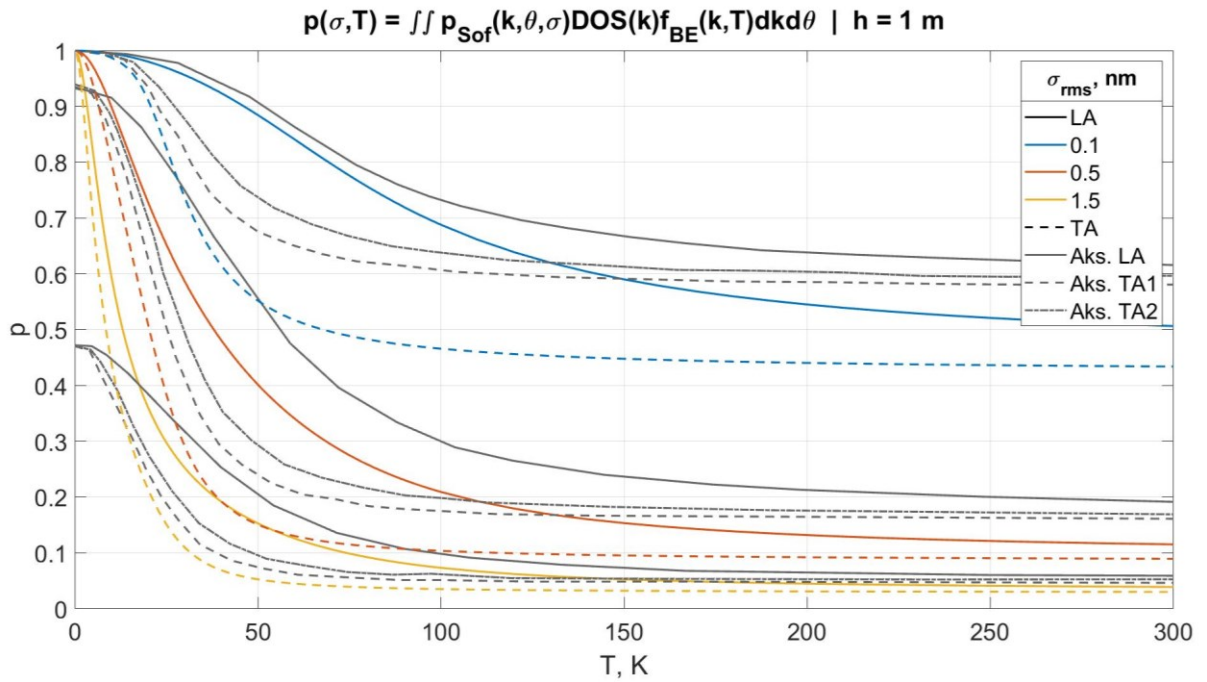


Рисунок 2.14. Средний параметр зеркального отражения для кремния. Сопоставление подхода (2.18) – цветные линии – с результатами статьи [47] – серые линии.

2.4.3. Расчет среднего параметра зеркального отражения

Обратимся к работе [47], где представлен метод расчета среднего $\bar{\rho}$, основанный на интегрировании по \mathbf{k} -пространству:

$$\bar{\rho}_j(T, \sigma) = \frac{\int p(\mathbf{k}, \sigma) f_{\text{BE}}[\omega_j(\mathbf{k}), T] d^3\mathbf{k}}{\int f_{\text{BE}}[\omega_j(\mathbf{k}), T] d^3\mathbf{k}} \quad (2.19)$$

где f_{BE} – равновесная функция распределения Бозе-Эйнштейна; $p(\mathbf{k}, \sigma) = \exp\left[-4(\mathbf{k}\mathbf{n})^2 \sigma_{\text{rms}}^2\right]$, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к поверхности. Таким образом осреднение по углу падения учитывается косвенно за счет перебора всех волновых векторов. Авторами рассматривалась задача о расчете коэффициента теплопроводности вдоль пленок кремния на изоляторе (Silicon on insulator, SOI) толщиной от 5 до 100 нм с учетом анизотропии и шероховатости поверхности. Выделим две особенности работы. Во-первых, учитывалась реальная функция плотности состояний, построенная в результате суммирования по всем главным

кристаллографическим направлениям. Во-вторых, в качестве выражения для параметра зеркального отражения использовалась модель Соффера [2].

Проведем аналогичный расчет, но с использованием квазиизотропного приближения (направление [100]). В таком случае элементарный объем в выражении (2.19) примет вид

$$d^3\mathbf{k} = k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi \quad (2.20)$$

Так как рассматривается модель, не учитывающая корреляцию в азимутальном направлении, то интеграл по $d\varphi$ уходит, а выражение (2.19) преобразуется к виду:

$$\bar{p}_j(T, \sigma) = \frac{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} p(k, \theta, \sigma) f_{BE}[\omega_j(k), T] k^2 \sin\theta dk d\theta}{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} f_{BE}[\omega_j(k), T] k^2 \sin\theta dk d\theta} \quad (2.21)$$

где используется формула Соффера в форме $p(k, \theta, \sigma) = \exp(-4k^2\sigma^2 \cos^2\theta)$. Для общности дальнейшего анализа в подынтегральном выражении перейдем к функции плотности состояний, $\text{DOS}_k(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}$:

$$\bar{p}_j(T, \sigma) = \frac{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} p(k, \theta, \sigma) f_{BE}[\omega_j(k), T] \text{DOS}_k(k) \sin\theta dk d\theta}{\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_0^{\pi/2} f_{BE}[\omega_j(k), T] \text{DOS}_k(k) \sin\theta dk d\theta} \quad (2.22)$$

Из сопоставления выражений (2.22) и (2.18) видно, что в подынтегральной функции появляется $\sin\theta$, который выполняет роль нелинейного распределения по θ .

В уравнении (2.22) можно перейти к интегрированию по круговой частоте. Для этого достаточно перейти от dk к $d\omega$ с использованием понятия групповой скорости $v_g(\omega) = d\omega / dk$

$$\bar{p}_j(T, \sigma) = \frac{\int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \int_0^{\pi/2} p(\omega_j, \sigma) f_{BE}(\omega_j, T) \text{DOS}(\omega_j) \sin \theta d\omega_j d\theta}{\int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \int_0^{\pi/2} f_{BE}(\omega_j, T) \text{DOS}(\omega_j) \sin \theta d\omega_j d\theta} \quad (2.23)$$

Обратим внимание, что здесь используется функция плотности состояний, построенная по круговой частоте: $\text{DOS}(\omega_j) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k^2(\omega_j)}{v_g(\omega_j)}$. Результаты расчета для кремния представлены на рис 2.15. В отличие от рис. 2.14, подход (2.22)-(2.23) приводит к хорошему согласию с результатами [47] в широком диапазоне температур от 30 до 300К. И лишь в узкой области от 0 до 30К полученные значения стремятся к 1, а значения [47] – к другим постоянным значениям. Возможно, данное обстоятельство связано с влиянием анизотропии кристалла либо с влиянием конечной толщины пленки в поперечном направлении.

Также проведем аналогичный расчет (2.22) с использованием формулы Ogilvy $p(k, \theta, \sigma) = \exp(-2k^2\sigma^2 \cos^2 \theta)$. Из рис. **Ошибка! Источник ссылки не найден.** видно, что уравнение Ogilvy приводит к повышению $\bar{p}_j(T, \sigma)$ до ~10% (в зависимости от T и σ).

2.4.4. Влияние толщины пленки на средний параметр зеркального отражения

Используя подход Прашера и Феланана для суммирования состояний в пространстве обратной решетки запишем выражение для расчета среднего \bar{p} тонкой пленки:

$$\bar{p}_j(L_z, T, \sigma) = \frac{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} p(k_z, \sigma) f_{BE}[\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z}{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} f_{BE}[\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z} \quad (2.24)$$

Остановимся на особенностях полученного выражения. Во-первых, Δk_z в числителе и знаменателе можно сократить, т.к. $\Delta k_z = \text{const}$. Во-вторых, суммирование идет только по неотрицательным значениям k_z . В-третьих, это

зависимость нижнего предела интегрирования k_{\min} от текущего значения k_z , что наглядно проиллюстрировано на рис. 2.17. Видно, что максимальное значение волнового числа соответствует k_{\max} , а минимальное k_z

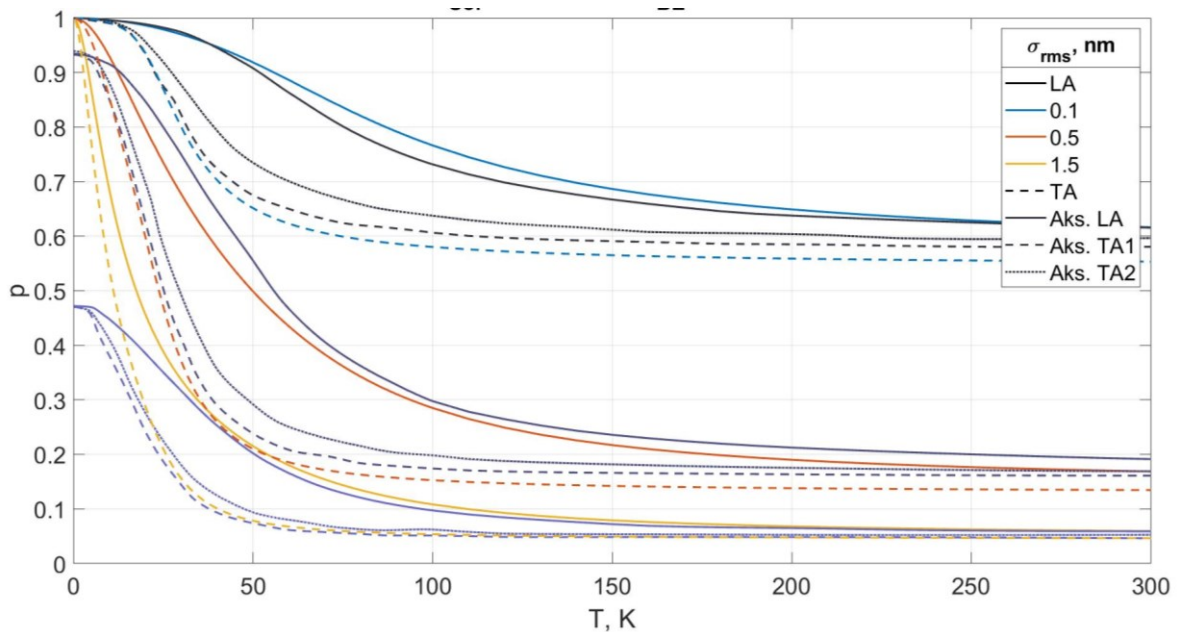


Рисунок 2.15. Средний параметр зеркального отражения для кремния. Цветные линии – подхода (2.22), серые линии – результаты расчета [47].

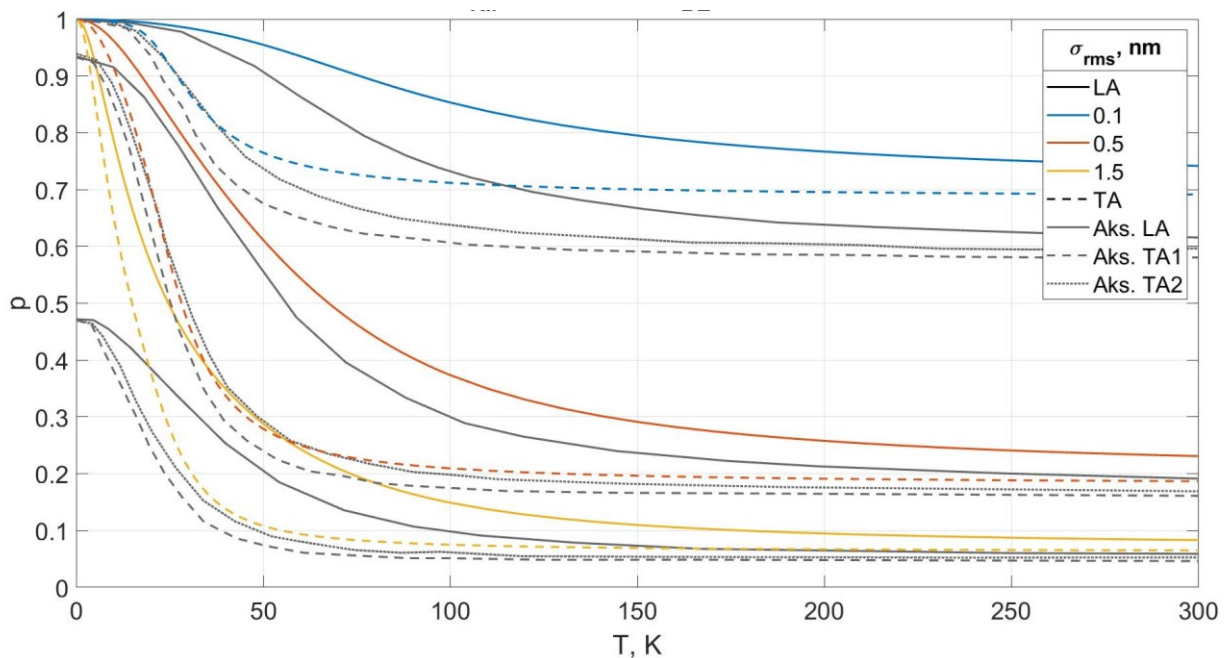


Рисунок 2.16. Средний параметр зеркального отражения для кремния. Цветные линии – подхода (2.22), серые линии – результаты расчета [47].

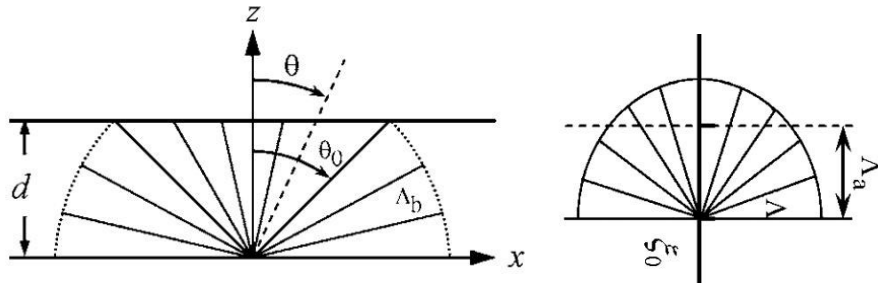


Рисунок 2.17. Иллюстрация для определения допустимых значений волнового числа k при фиксированном значении k_z

Далее проведены расчеты для пленки по выражению (2.24) в двух случаях:

- 1) шероховатостей 0.1, 0.5 и 1.5 (как у Аксамиджа [47]) – рис. 2.18;
- 2) σ_{rms} 1, 5, 10, 50, 100 и 500 нм – рис. 2.19.

Видно, что результаты в случае 1 (для пленок) отличаются друг от друга и от расчета для Bulk слабо. Однако при увеличении шероховатостей (случай 2) видна сильная зависимость значений $\bar{p}_j(L_z, T, \sigma)$ от толщины пленки. При этом с увеличением L_z значение $\bar{p}_j(L_z, T, \sigma)$ будет стремиться к случаю Bulk, полученному ранее.

Требуется дальнейший анализ величины $\bar{p}_j(L_z, T, \sigma)$ при фиксированном значении T и разных L_z и σ . Это позволит наглядно убедиться в том, что при увеличении толщины результаты расчета $\bar{p}_j(L_z, T, \sigma)$ естественным образом переходят в случай Bulk 3D.

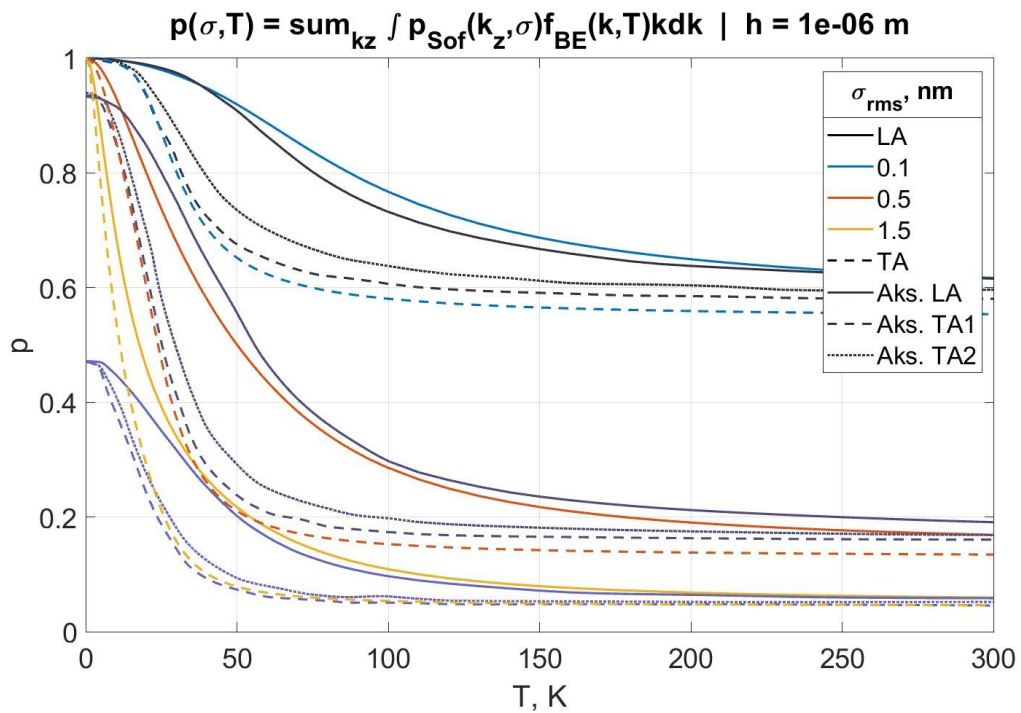
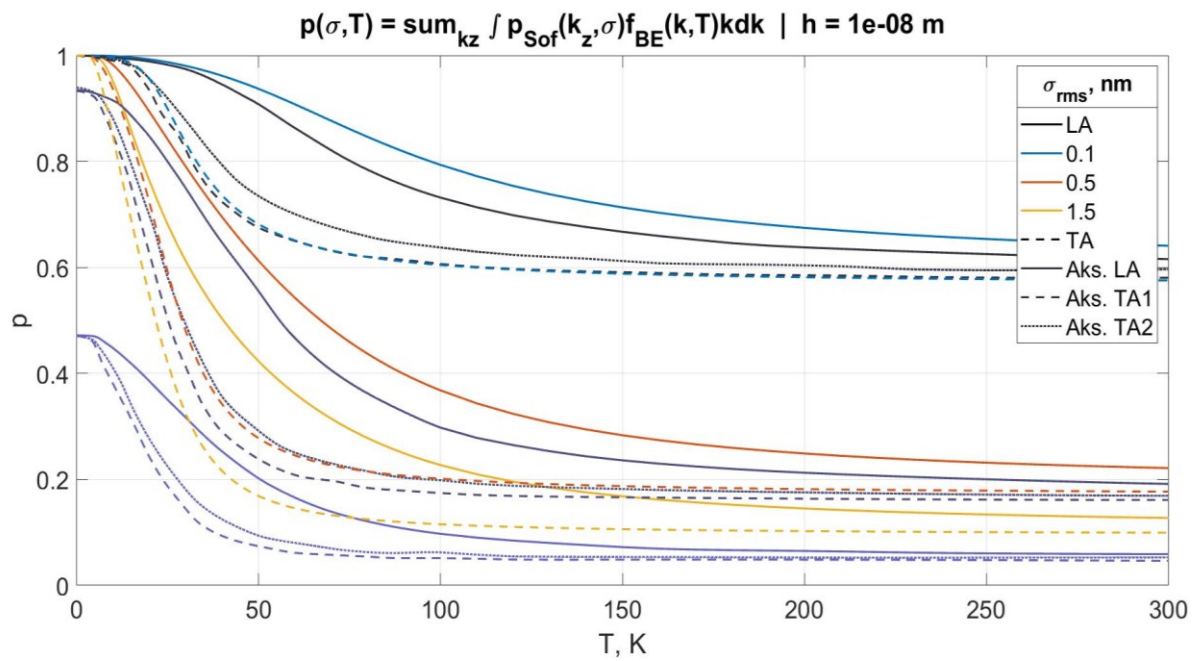
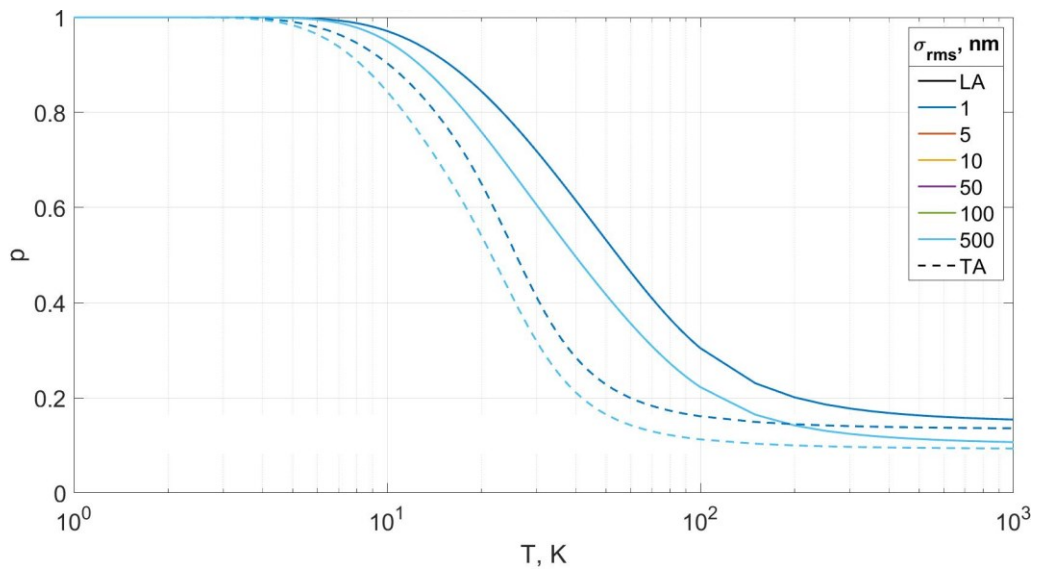
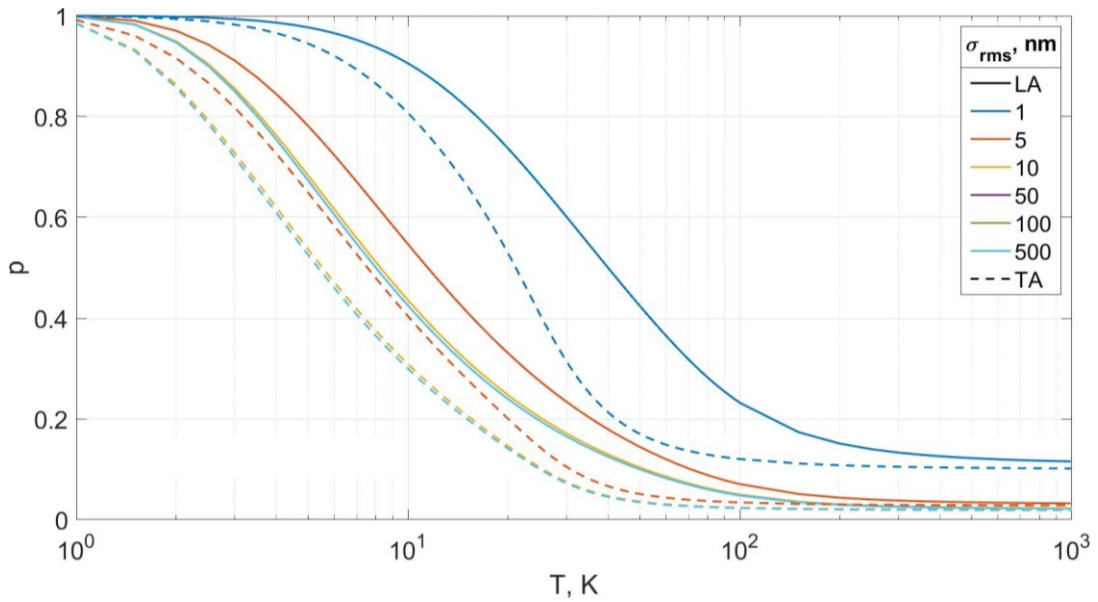


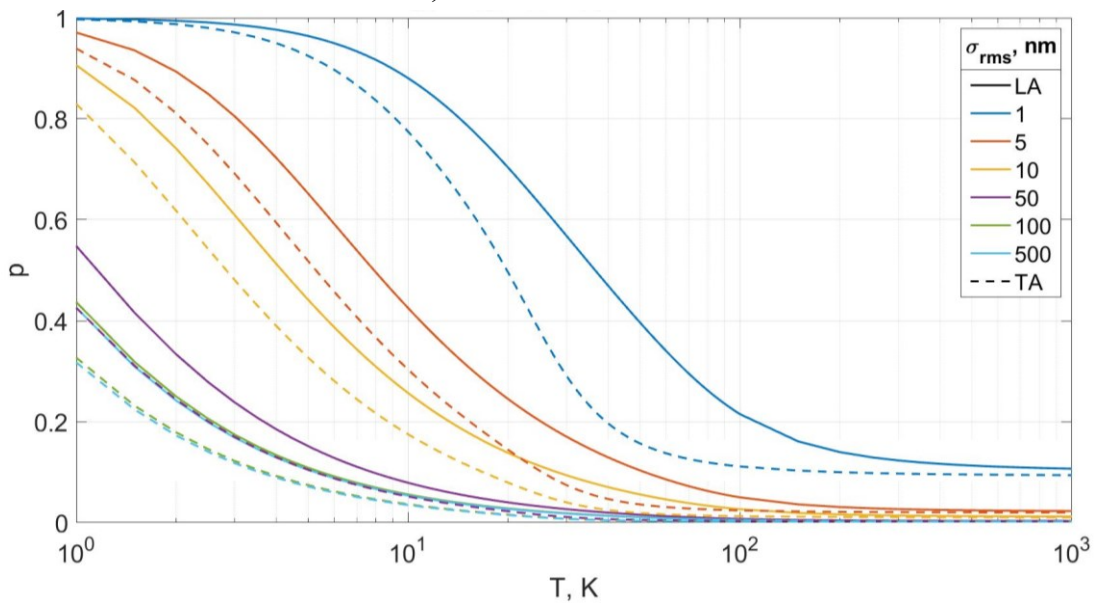
Рисунок 2.18. Средний параметр зеркального отражения для пленок кремния толщиной 10 нм и 1 мкм. Цветные линии соответствуют подходу (2.24), а серые – [47]. а) Пленка толщиной 10 нм. б) Пленка толщиной 1 мкм



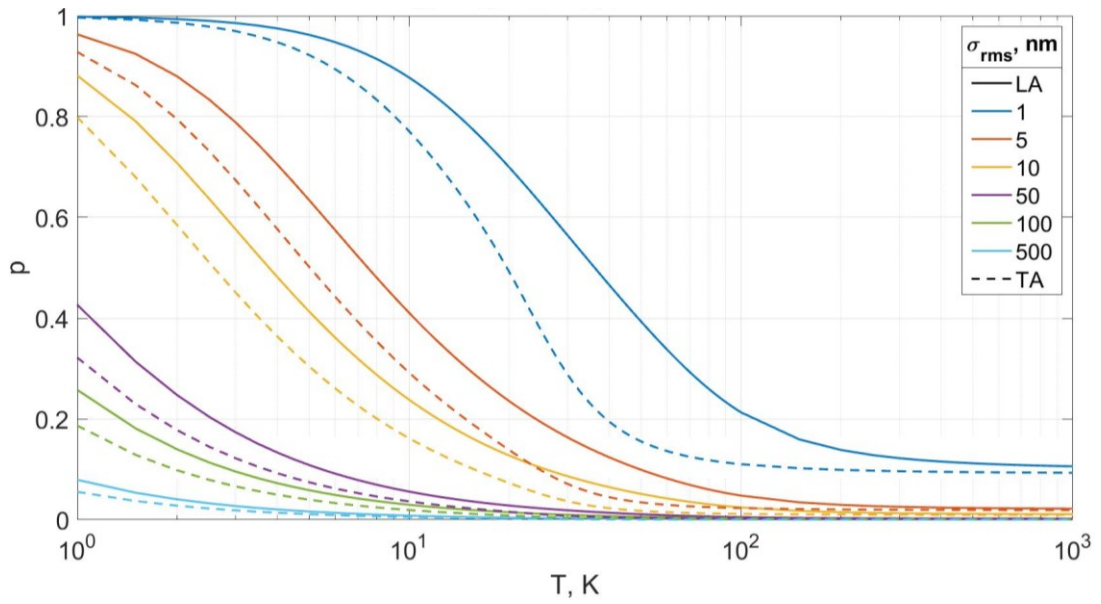
а) толщина 10 нм



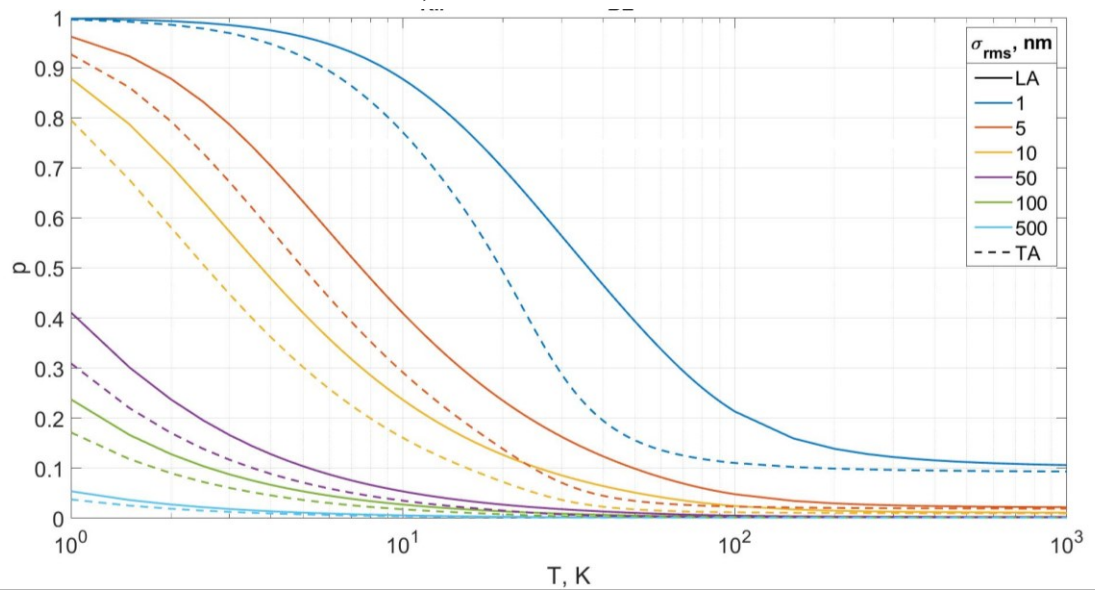
б) толщина 50 нм



в) толщина 500 нм

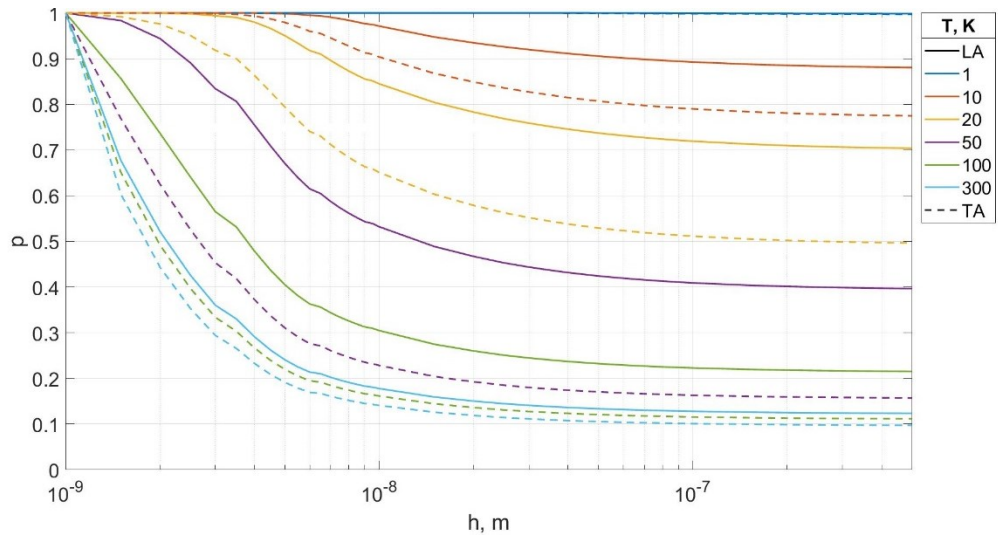


г) толщина 5 мкм

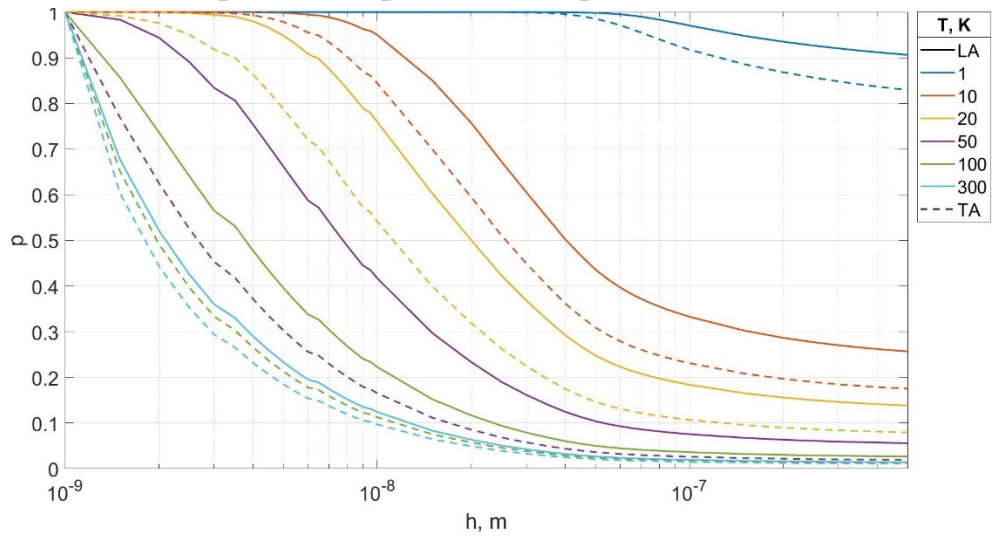


д) толщина 1 м

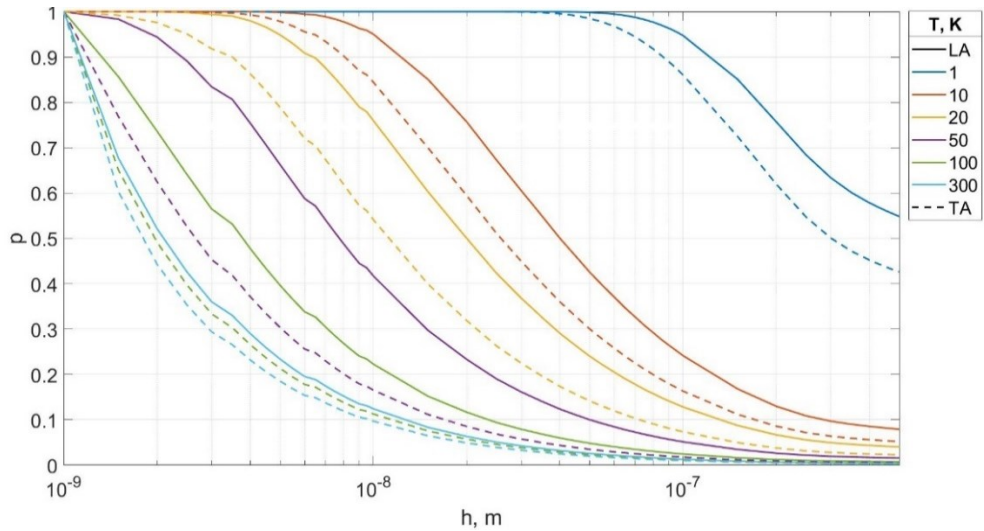
Рисунок 2.19. Средний параметр зеркального отражения для пленок кремния толщиной от 10 нм и до 5 мкм. Линии соответствуют подходу (2.24).



а) среднеквадратичная шероховатость 1 нм

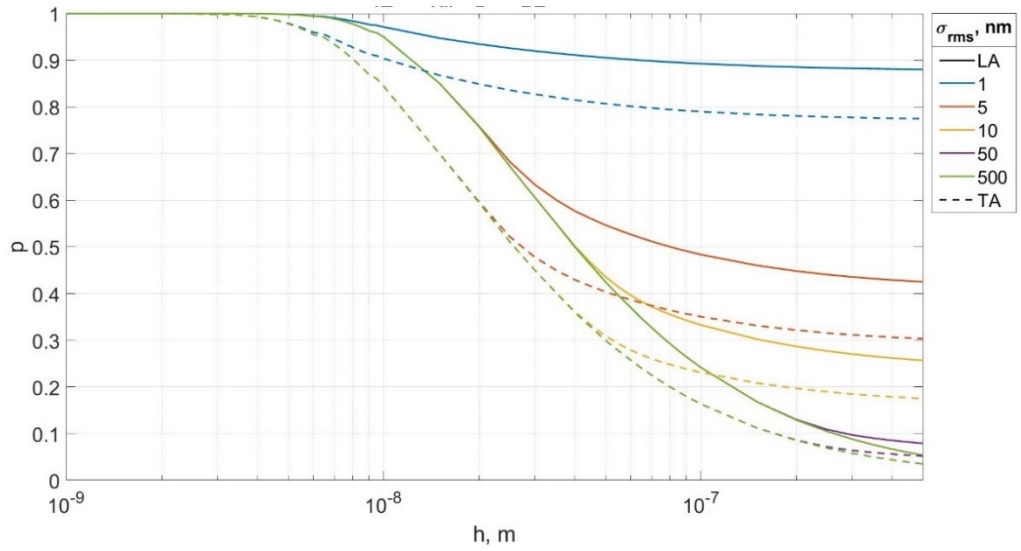


б) среднеквадратичная шероховатость 10 нм

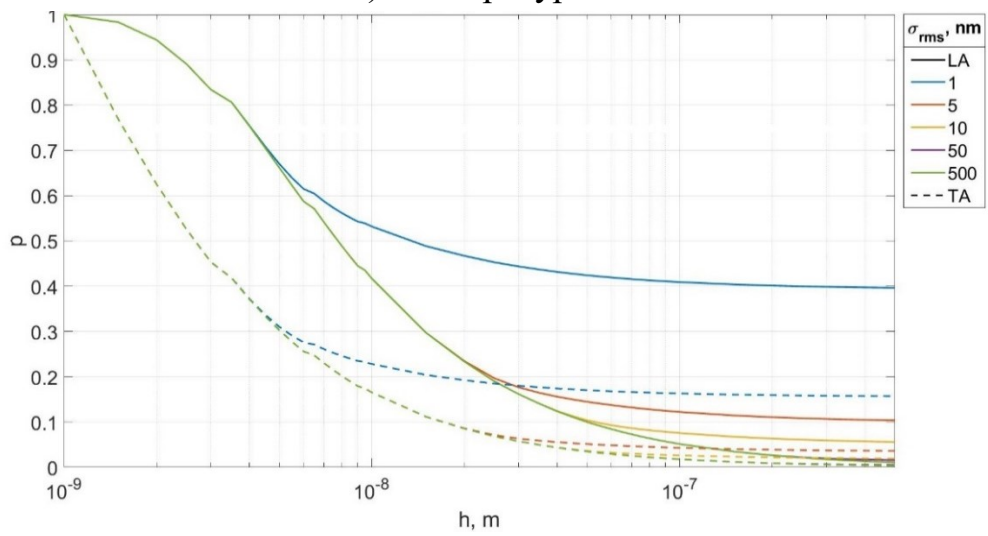


в) среднеквадратичная шероховатость 50 нм

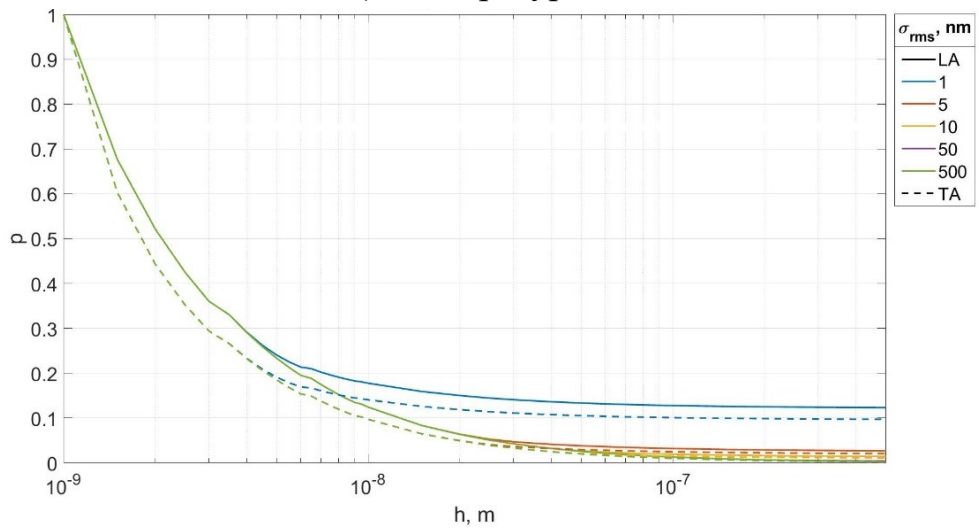
Рисунок 2.20. Средний параметр зеркального отражения для пленок кремния в зависимости от толщины h для разных температур T .



а) температура 10К



б) температура 50К



в) температура 300К

Рисунок 2.21. Средний параметр зеркального отражения для пленок кремния в зависимости от толщины h для разных температур T и шероховатостей σ_{rms} .

2.4.5. Расчет характерного угла рассеяния

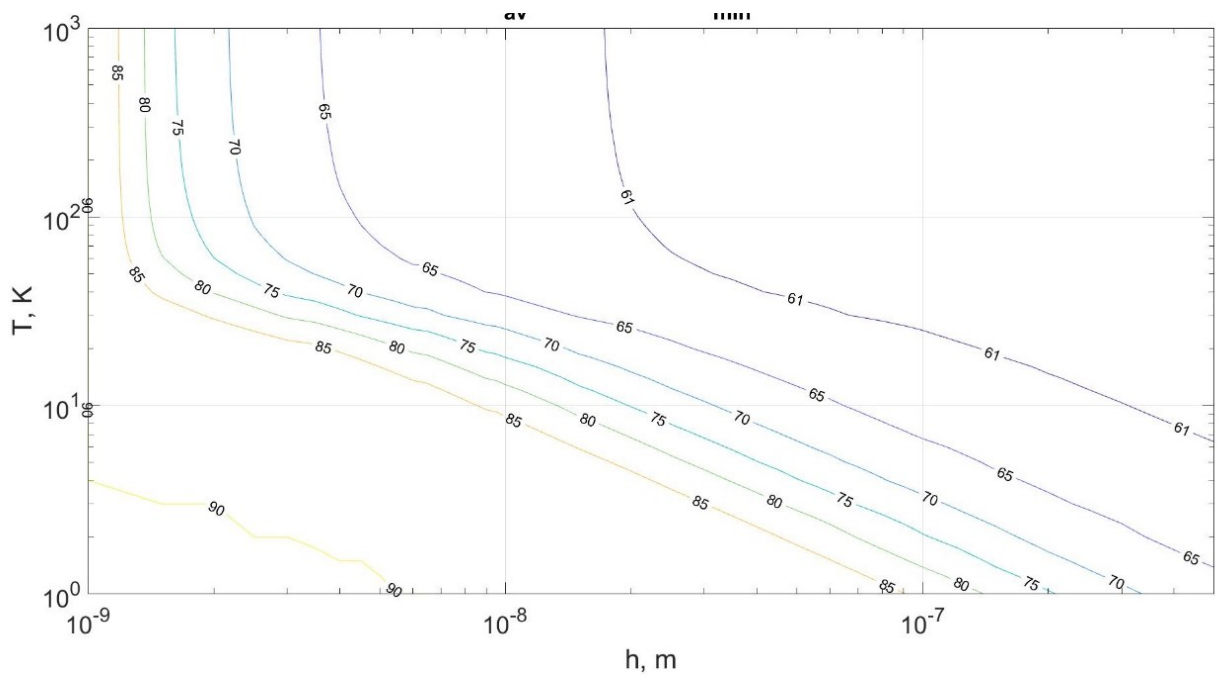
По аналогии с выражением для расчета среднего $\bar{\rho}$ тонкой пленки (РР.20) рассмотрим величину среднего угла рассеяния фононов для заданной толщины пленки и температуры:

$$\left\langle \frac{k_z}{k} \right\rangle_j = \frac{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{k_z}{k} f_{BE} [\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z}{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} f_{BE} [\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z} \quad (2.25)$$

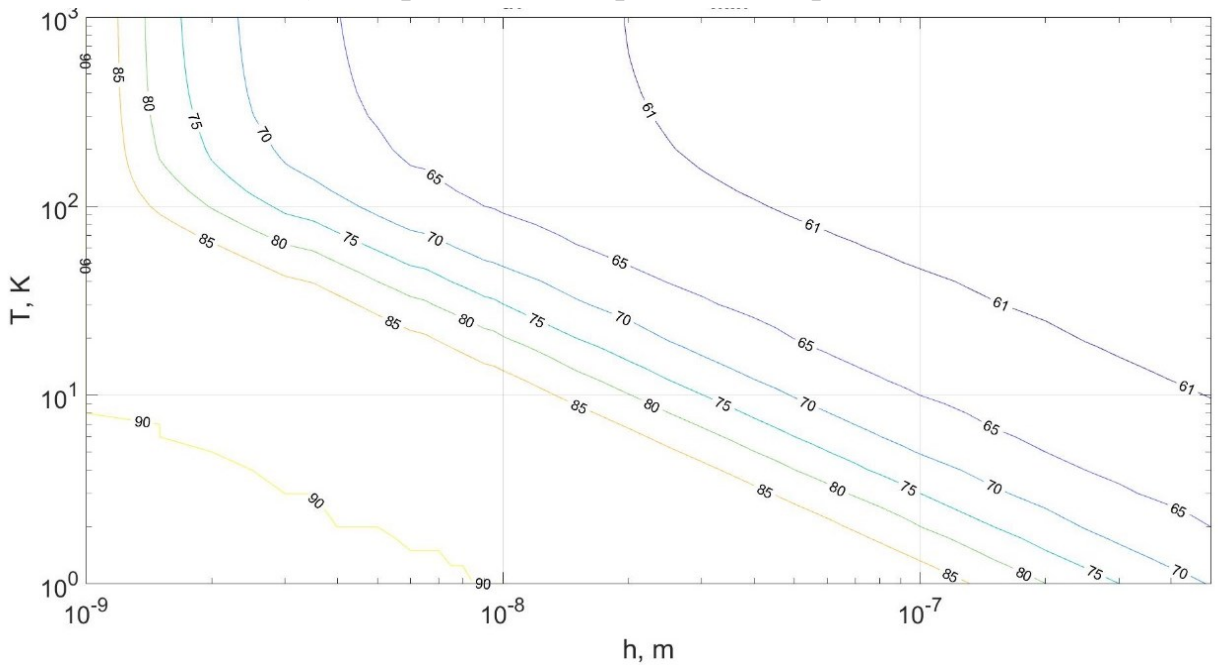
После элементарных преобразований получаем величину среднего угла рассеяния

$$\bar{\theta}(L_z, T) = \arccos \left\langle \frac{k_z}{k} \right\rangle_j \quad (2.26)$$

Результаты расчета для кремния представлены на рис. 2.22.



а) для фононов поперечной поляризации



б) для фононов продольной поляризации

Рисунок 2.22. Зависимость среднего угла отражения от толщины h и температуры T .

Выводы по главе 2

1. Анализ теплопереноса в структурах микро- и наномасштаба показал, что эффективная теплопроводность определяется температурой и набором характерных линейных размеров: средней квадратичной шероховатостью, характерным размером образца, средней длиной волны фононов и средней длиной свободного пробега.

2. Необходима разработка новой модели взаимодействия фононов с шероховатой границей, учитывающей как значение среднеквадратичной шероховатости поверхности, так и интервал корреляции.

3. Сформулирован метод оценки режима теплопереноса и вида рассеяния фононов на границе в зависимости от величины соответствующего характерного размера и температуры. В качестве примера проведены расчеты для кремния и получены соответствующие диаграммы, которые могут быть использованы на практике.

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**.

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 полувольт 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, 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.

Глава 3. Разработка модели взаимодействия фононов с шероховатой границей образца

3.1. Модель шероховатой границы

Представим процесс последовательного взаимодействия фононов с шероховатыми границами образца как комбинацию двух процессов, сменяющих друг друга. Первый процесс – рассеяние на шероховатой границе, т.е. непосредственный расчет взаимодействия фонона с шероховатой границей образца. Второй – процесс распространения от одной границе к противоположной.

Для решения первой задачи необходимо непосредственно описать шероховатую границу. Здесь в качестве модели рассматривается подход, предложенный в книге Басса и Фукса [114]. За основу взята модель случайной поверхности, для которой образование неровностей поверхности является результатом действия большого числа независимых факторов. В частном случае для двумерной поверхности $z = \zeta(x, y)$ с образующими вдоль оси y углы наклона (модуль производной нормальной случайной функции $n = |\nabla\zeta|$) распределены по закону Гаусса:

$$w_1(n) = \frac{1}{\gamma_x} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{n^2}{2\gamma_x^2}\right), \quad (0 \leq n < \infty) \quad (3.1)$$

Далее в выражении (3.1) 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 φ в соответствии с соотношением $n = \tan\varphi$. Тогда нормальное распределение (3.1) примет следующую форму

$$w(\varphi) = \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\tan^2\varphi}{2\gamma^2}\right) \frac{1}{\cos^2\varphi}, \quad (-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2) \quad (3.2)$$

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

Проанализируем распределение для градиентов профиля (3.1) и углов (3.2) при фиксированном значении среднеквадратичного угла раскрытия профиля $\varphi_\gamma = 10^\circ$, который соответствует $\gamma = \tan \varphi_\gamma \cong 0.18$. На рисунке 3.1 синей линией представлено нормальное распределение. По оси абсцисс показаны значения производной n и соответствующие им величины углов наклона профиля φ_n в градусах. Далее рассматриваются 3 диапазона:

1) в пределах одного среднеквадратического отклонения, т.е. от $-\gamma$ до γ (или то же самое, что диапазон углов $\varphi_\gamma \in [-10^\circ, 10^\circ]$)

2) в пределах двух γ , т.е. от -2γ до 2γ ($\varphi_\gamma \in [-19^\circ, 19^\circ]$)

3) в пределах трех γ , т.е. от -3γ до 3γ ($\varphi_\gamma \in [-28^\circ, 28^\circ]$)

Определяя площадь под графиком распределения в указанных диапазонах, легко установить, что в пределах одного среднеквадратического отклонения лежит 68,27% значений углов наклона профиля. В пределах двух среднеквадратических отклонений – уже 95,45%, а в пределах трех – 99,73%. Это означает, что вероятность того, что значение производной превысит 3γ , составляет менее 0,27%, т.е. пренебрежимо мала. Правило, утверждающее, что вероятность того, что случайная величина отклонится от своего математического ожидания более чем на три среднеквадратических отклонения, практически равна нулю, называется правилом трех сигм (3-sigma rule). Таким образом, значение угла профиля в пределах 3γ является наилучшим для использования в качестве φ_{\max} , т.к. с одной стороны достигается высокая точность расчета интеграла 99,73%, и минимизируются затраты вычислительных ресурсов на расчет «хвостов», которые не оказывают существенного вклада (менее 0,27%).

В рассматриваемом примере на рисунке 3.1 среднее квадратическое отклонение наклона профиля $\varphi_\gamma = 10^\circ$. Следовательно, вероятность встретить углы в пределах 10° составляет 68,27%, более 19° – 4,55% и более 28° оказывается менее 0,27%. В соответствии с правилом трёх сигм в качестве φ_{\max} будет использоваться значение угла наклона профиля 28° .

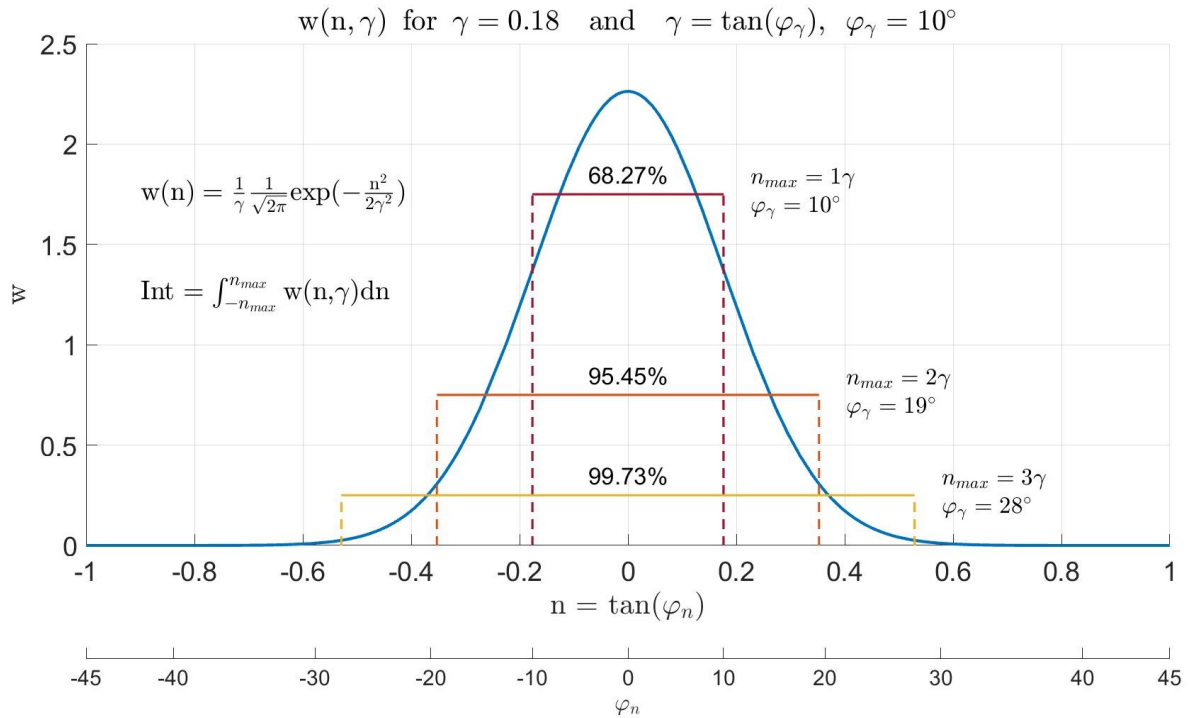


Рисунок 3.1. Распределение производной нормальной случайной функции (углов наклона профиля).

Далее на рисунке 3.2 приводится визуализация нормального распределения и правила трех сигм для разных значений среднее квадратических отклонений углов φ_γ наклона профиля: 2° , 5° , 10° и 15° . Обратим внимание, что правило трех сигм позволяет для заданного γ определить диапазон углов $\varphi_{3\gamma}$, охватывающий 99,73% возможных случайных значений.

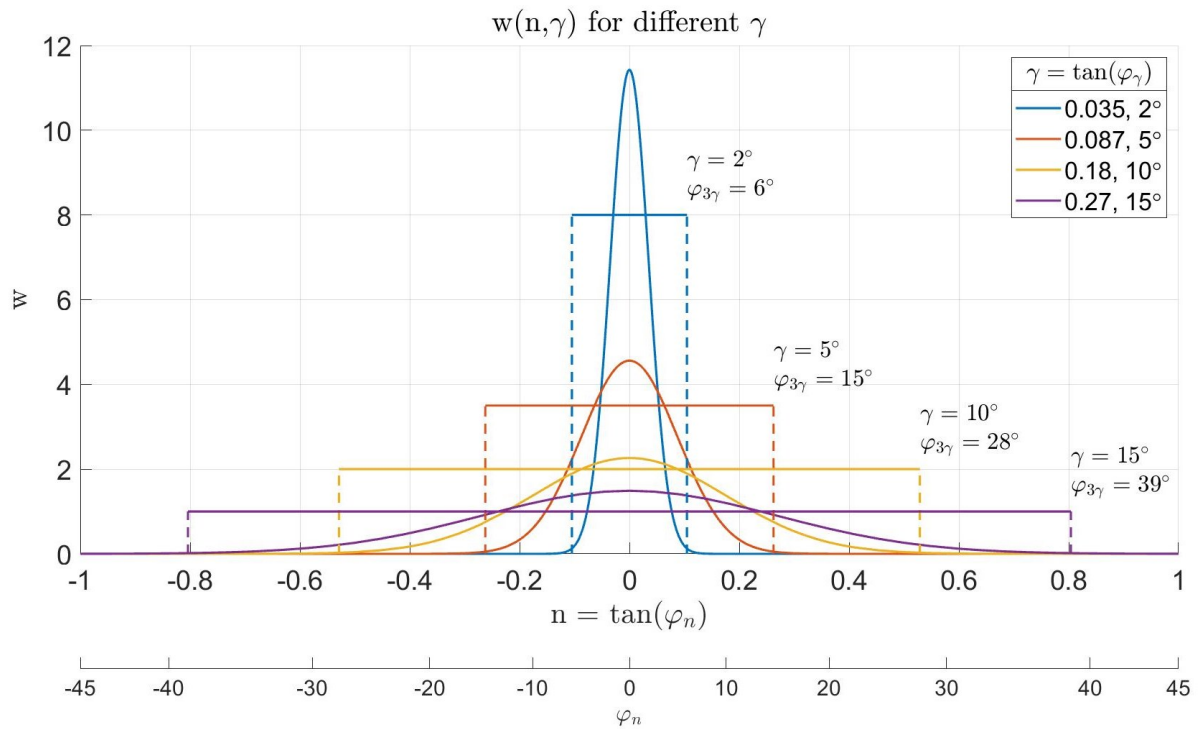


Рисунок 3.2. Распределение производной нормальной случайной функции для разных значений среднеквадратичных отклонений углов наклона профиля.

3.2. Методика расчета взаимодействия фононов с шероховатой границей

3.2.1. Расчет углов отражения

Описание взаимодействия фононов с шероховатой границей основан на применении приближения Кирхгофа к профилю шероховатой поверхности. Таким образом, в каждой точке поверхности строятся касательные, от которых происходит отражение фононов. Из геометрического анализа задачи отражения, представленной на рисунке 3.3, заключаем, что угол отражения будет определяться как

$$\psi = \theta - 2\varphi, \quad -\varphi_{\max} < \varphi < \varphi_{\max} \quad (3.3)$$

где θ – угол падения фонона относительно нормали к средней линии профиля; где φ – угол наклона касательной плоскости к средней линии профиля. Величина 2φ соответствует отклонению угла отражения от зеркального.

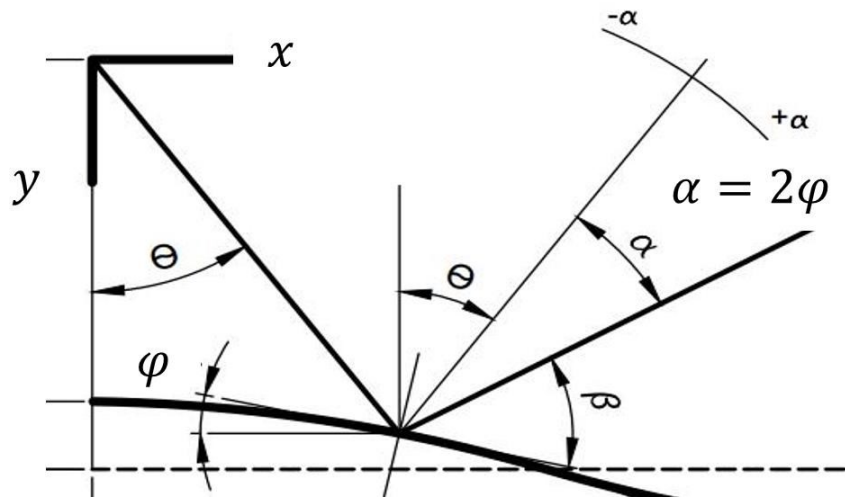


Рисунок 3.3. Основные геометрические параметры при отражении фононов от шероховатой границы: θ – угол падения; φ – угол, характеризующий наклон профиля относительно средней линии; β – угол «отражения»; $\alpha = 2\varphi$ – угол, характеризующий разницу между зеркальным отражением и диффузным. Указанные углы задаются относительно нормали к поверхности.

Важно обратить внимание, что угол ψ соответствует отражению в сторону распространения теплоты, когда $\psi > 0$, и в обратном направлении, когда $\psi < 0$, что возможно только для возрастающего участка профиля, $\varphi > 0$.

Проведем анализ угла отражения ψ в зависимости от угла падения θ и угла наклона профиля φ . На рисунке 3.4 представлены результаты расчета $\psi(\theta, \varphi)$. Диапазон углов наклона профиля φ выбран в соответствии с рисунком 3.2, где показано, что для поверхностей с малыми градиентами шероховатостей, диапазон от -30° до 30° охватывает более 99% случайных значений φ . Черной сплошной линией ($\psi = 0$) указана граница, разделяющая области положительных и отрицательных значений ψ . Соответственно выше линии $\psi = 0$ находятся область значений (θ, φ) , при которых фонон отражается против направления распространения теплоты, а ниже – широкая область, где фононы отражаются в сторону распространения теплоты.

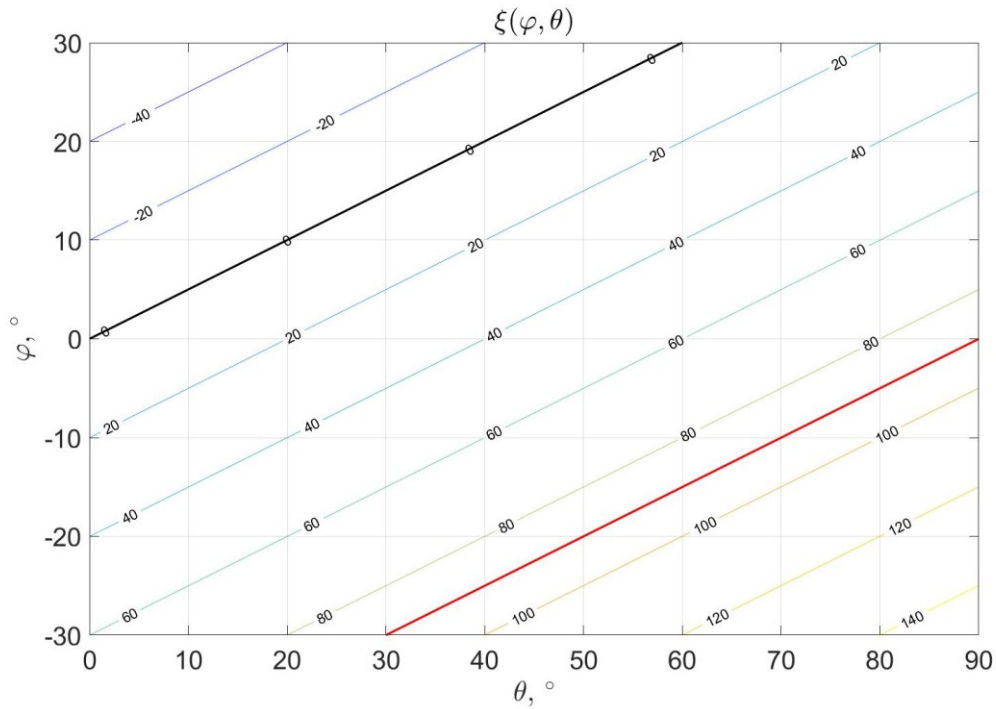


Рисунок 3.4. Значения углов отражения $\psi = \theta - 2\varphi$ от шероховатой поверхности в зависимости от угла падения θ и угла наклона профиля φ .

Из рисунка 3.4 видно, что при увеличении угла падения θ , увеличивается область $\psi < 0$, а доля фононов, отраженных в обратном направлении, уменьшается. Для того, чтобы точно определить долю фононов, отраженных в направлении распространения теплоты δ_+ и в обратном направлении δ_- , воспользуемся функцией распределения (3.2) и запишем выражение (для момента первого порядка)

$$\delta_+(\theta, \gamma) = \frac{\langle \psi_+ \rangle(\theta, \gamma)}{\langle \psi_{total} \rangle(\theta, \gamma)} \quad (3.4)$$

где $\langle \psi_+ \rangle(\theta, \gamma)$ – интеграл по положительной области углов отражения $\psi > 0$, а $\langle \psi_{total} \rangle(\theta, \gamma)$ – интеграл по всей области углов ψ , определяются по формулам (моментов первого порядка)

$$\langle \psi_+ \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi_+(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi \quad (3.5)$$

$$\langle \Psi_{total} \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |\Psi(\varphi, \theta)| w(\varphi, \gamma) d\varphi \quad (3.6)$$

соответственно, доля фононов, отраженных в противоположном направлении, определяется по выражению

$$\delta_-(\theta, \gamma) = 1 - \delta_+(\theta, \gamma) \quad (3.7)$$

Результаты расчета долей фононов δ_+ и δ_- представлен на рисунке 3.5. Видно, что большая часть фононов отражается в направлении распространения тепла. Так для заданного профиля с известной шероховатостью (к примеру, градиент $\gamma = 2^\circ$) при увеличении угла падения влияние наклона профиля ослабевает и фононы отражаются вдоль направления распространения. В случае увеличения шероховатости (углов наклона профиля, γ) доля фононов δ_+ уменьшается, хотя и остается определяющей.

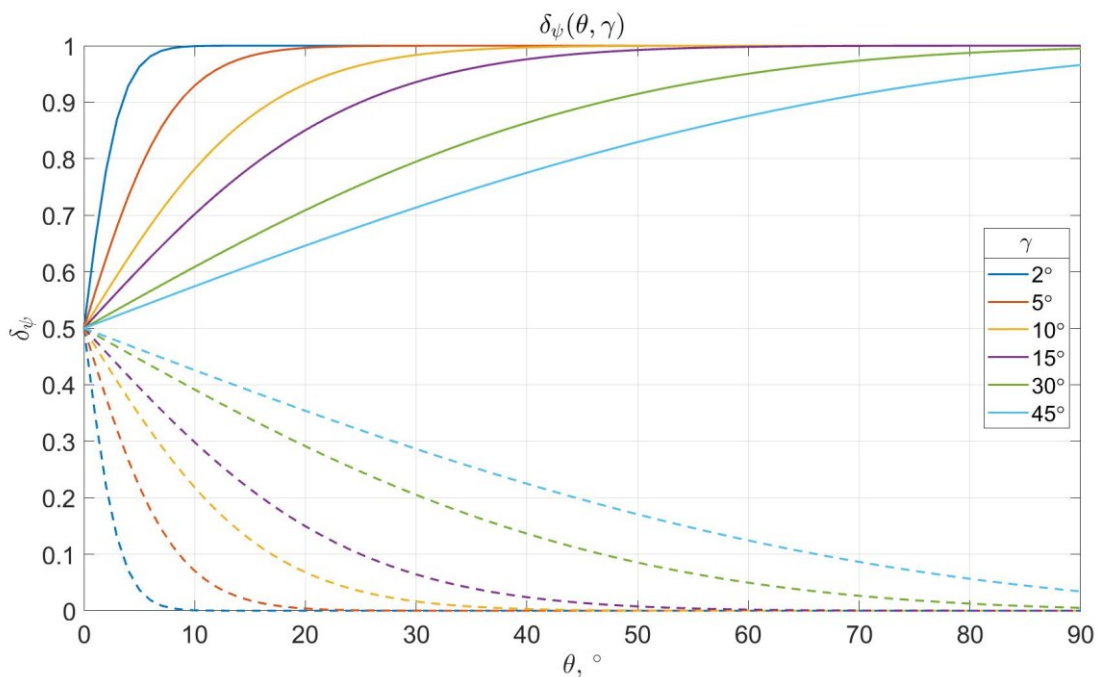


Рисунок 3.5. Доли фононов δ_+ отраженных вдоль направления распространения (сплошные линии) и δ_- — против направления распространения (штриховые линии).

3.2.2. Расчет среднего угла отражения

Перейдем к расчету средних значений от функций, играющих определяющую роль в задаче отражения фононов от шероховатой границы.

Задача 1. Расчет средних углов отражения $\psi = \theta - 2\varphi$. Среднеквадратичное значение угла отражения представляет собой момент второго порядка

$$\langle \psi^2 \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi^2(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi \quad (3.8)$$

А среднее значение ψ представляет собой момент первого порядка

$$\begin{aligned} \langle \psi \rangle &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (\theta - 2\varphi) w(\varphi, \gamma) d\varphi = \\ &= \theta \underbrace{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \varphi w(\varphi, \gamma) d\varphi}_{=1} - 2 \underbrace{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \varphi w(\varphi, \gamma) d\varphi}_{=0} = \theta \end{aligned} \quad (3.9)$$

То есть среднее значение угла отражения ψ совпадает с углом падения, что соответствует случаю зеркального отражения.

На рисунке 3.6 представлены значения углов $\sqrt{\langle \psi^2 \rangle}(\theta, \gamma)$, определенных по формуле (3.8). Так для наклонов профиля 2° , 5° , т.е. при малой величине γ , среднеквадратичный угол отражения соответствует случаю зеркального отражения $\langle \psi \rangle = \theta$, см. выражение (3.9). Соответственно, для значительных градиентов γ (линии 15° , 30° и 45° на рисунке) среднеквадратичное значение угла отражения растёт. Это связано с тем, что в выражении (3.8), как и в выражении (6), происходит учет фононов δ_- по абсолютному значению и, как следствие, завышение $\sqrt{\langle \psi^2 \rangle}$ при углах, близких к $\theta = 0$. К примеру, при $\gamma = 30^\circ$ и $\theta = 0$ в соответствии с функцией распределения (2), рис. 3.1, большая часть отраженных фононов должна быть внутри интервала $\sqrt{2}\gamma$, что соответствует углу $\sim 40^\circ$, а не 55° , как на рисунке 3.6. Данное обстоятельство противоречит физической картине процесса, поэтому проведём разделение отраженных фононов на два потока: в направлении распространения теплоты I_+ и в обратном $-I_-$.

Введём функцию Хевисайда $H(\psi)$ для разделения положительных $\psi_+ = \psi \cdot H(\psi)$ и отрицательных $\psi_- = \psi \cdot H(-\psi)$ значений углов отражения ψ . Тогда определение средних углов отражения для потоков фононов I_+ и I_- проводим по выражениям, аналогичным (3.8):

$$\langle \psi_+^2 \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi_+^2(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi, \quad (3.10)$$

$$\langle \psi_-^2 \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi_-^2(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi. \quad (3.11)$$

Результаты расчета среднеквадратичных углов ψ_+ и ψ_- представлен на рисунке 3.6. Из анализа полученных среднеквадратичных углов отражения можно заключить, что величина ψ_+ при скользящих углах падения ($\theta \sim 90^\circ$) близка к значению (3.8), см. рис. 3.6. А при малых углах падения ($\theta \sim 0^\circ$), в отличие от выражения (3.8) значение ψ_+ соответствует ожидаемому значению из распределения (2), рис. 3.1.

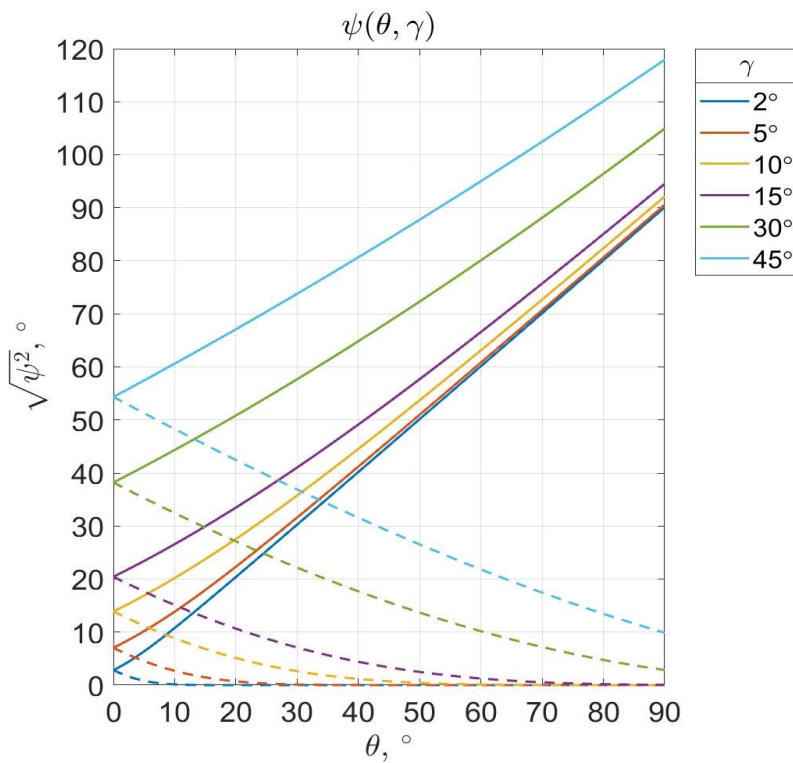


Рисунок 3.6. Значение среднеквадратичного угла отражения $\sqrt{\langle \psi^2 \rangle}$ для потоков фононов I_+ и I_- в зависимости от угла падения θ и градиентов наклона профиля γ (выраженного в градусах, т.е. значение $\tan \gamma$). Сплошные линии соответствуют ψ_+ , а штриховые - ψ_- .

3.2.3. Расчет среднего косинуса угла отражения

Необходимость определения среднего значения косинуса угла отражения связана с расчетом средней длины пробега между шероховатыми стенками. Рассмотрим два выражения

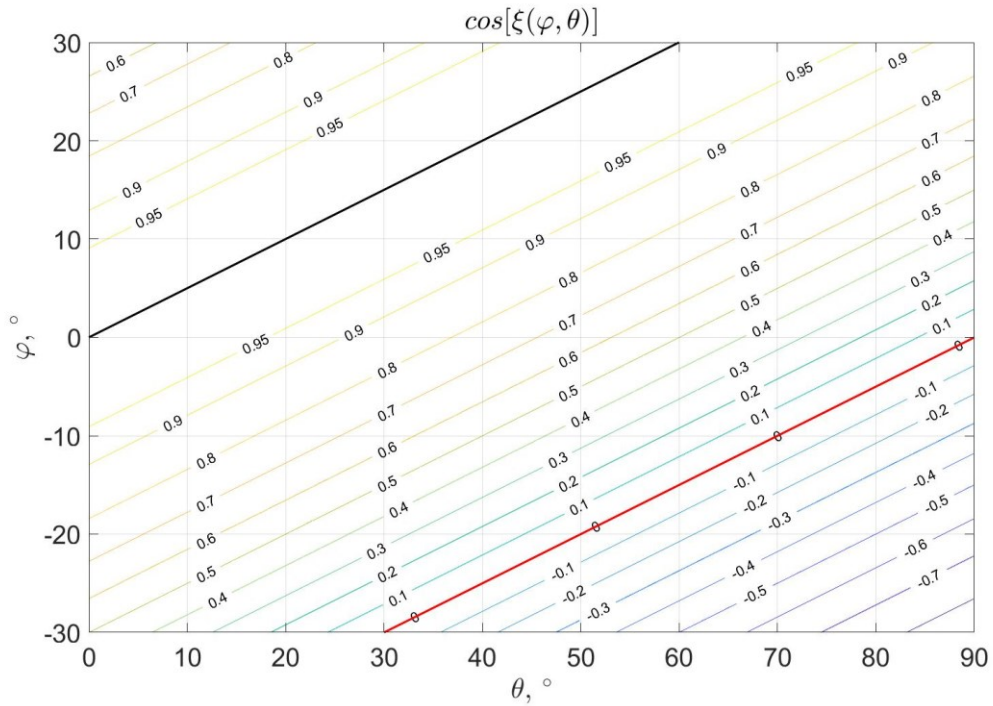
$$\langle \cos^2 \psi \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \psi(\varphi, \theta) w(\varphi, \gamma) d\varphi \quad (3.12)$$

$$\langle \cos^{-2} \psi \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{w(\varphi, \gamma) d\varphi}{\cos^2 \psi(\varphi, \theta)}. \quad (3.13)$$

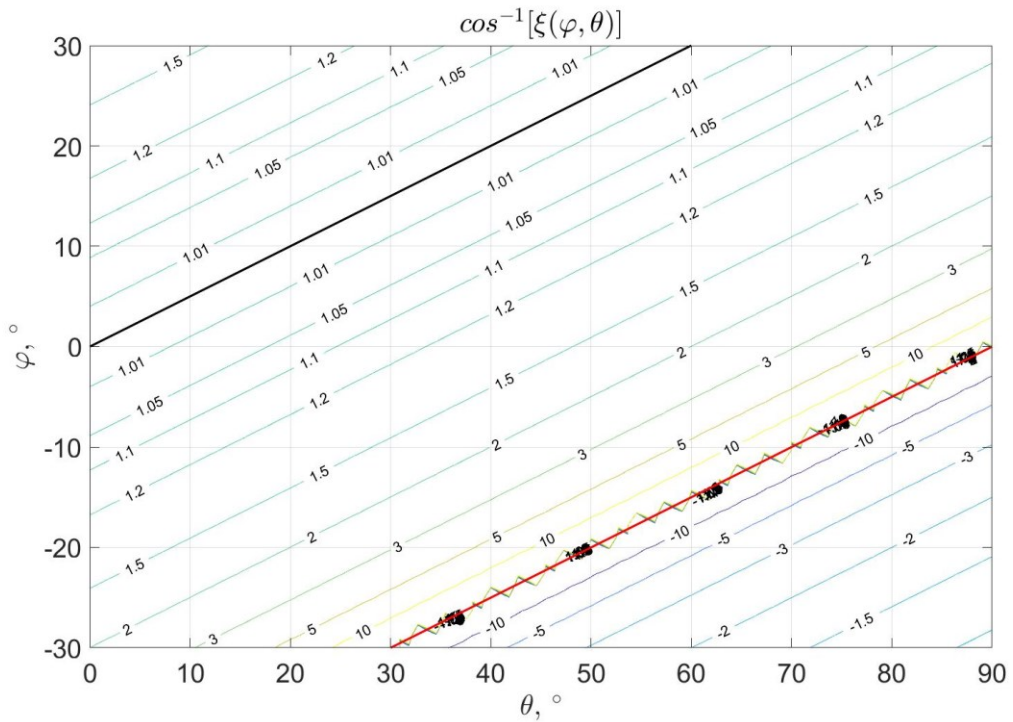
Первым делом по аналогии с рис. 3.4 рассмотрим значение $\cos \psi$ и $\cos^{-1} \psi$ в зависимости от угла падения θ и локального угла наклона профиля шероховатой поверхности φ . Результаты расчета для области, аналогичной рис. 3.4, представлены на рис. 3.7 и **Ошибка! Источник ссылки не найден..**

Так на рис. 3.7 видно, что в области положительных углов отражения (ниже черной линии, соответствующей $\cos \psi = 1$ возникает область с отрицательными значениями косинусов (при переходе через линию $\cos \psi = 0$, на рис. 3.4, 3.7 и **Ошибка! Источник ссылки не найден.** показана красным). Графическая визуализация этого случая представлена на рисунке 3.8. Данную область будем называть участком затенения, она не физична и требует исключения из рассмотрения.

Аналогичный результат получаем при рассмотрении $\cos^{-1} \psi$ на рисунке **Ошибка! Источник ссылки не найден..** Здесь линия $\cos \psi = 0$ (показана красным) переходит в значение $\cos^{-1} \psi = \pm\infty$, на что указывает результат численного решения – линия в форме зигзага, характеризующая область резкого роста $\cos^{-1} \psi$. Подчеркнем, что область затенения нефизична и требует последующего исключения.



а)



б)

Рисунок 3.7. Значения а) косинуса угла отражения $\psi = \theta - 2\varphi$ от шероховатой поверхности в зависимости от угла падения θ и угла наклона профиля φ ; и б) значение $\cos^{-1} \psi$. Черная линия соответствует разделению потока фоонов на I_+ и I_- . Красная линия и область под ней соответствуют участку затенения.

Обратим внимание, что участок затенения явно включает не только область $\cos \psi < 0$ (рис. 3.8), но и область с пересечением профиля (рис. 3.9).

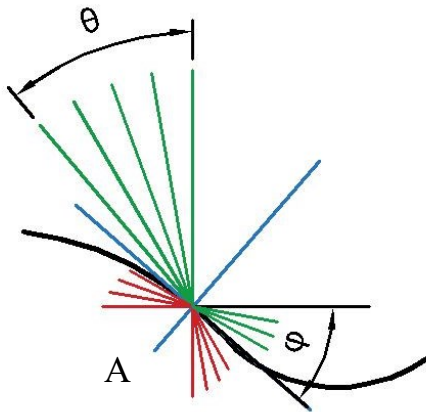


Рисунок 3.8. Отражение лучей от касательной плоскости профиля шероховатой поверхности в произвольной точке А.

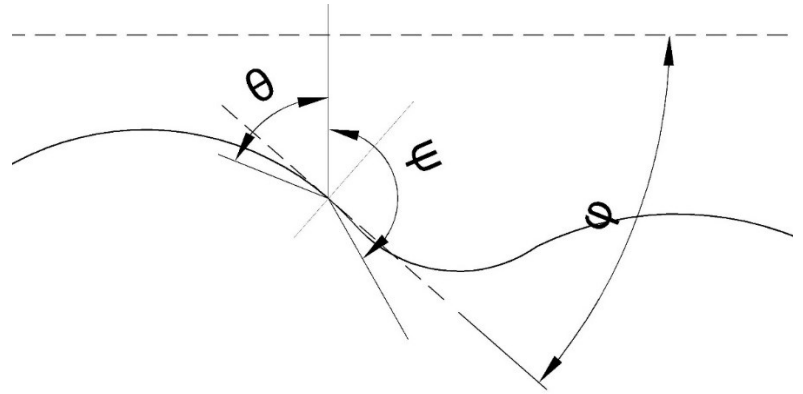


Рисунок 3.9. Визуализация участка затенения, в случае пересечения профиля пределы образца.

3.2.4. Учет углов затенения

При рассмотрении задачи о рассеянии фононов на шероховатой границе, падающих под углом θ относительно нормали к поверхности, появляются ограничения, накладываемые на допустимые значения углов отражения ψ . Рассмотрим их поподробнее.

Случай 1. В результате отражения от поверхности волновой вектор фонона должен быть направлен внутрь образца.

Важно, что исходным в предложенном авторами методе анализа рассеяния фононов на шероховатой поверхности является не реальный профиль поверхности, а углы наклона профиля (градиент γ) и, соответственно, распределение $w(\gamma)$. Поэтому рассмотрим произвольную точку поверхности и проанализируем возможные углы отражения (а соответственно и падения) относительно касательной плоскости.

Так на рис. 3.8 рассматривается произвольная точка А профиля поверхности, в которой строится касательная плоскость с углом наклона φ . Так как углы падения

θ изменяются от 0 до $\pi/2$, то видно, что касательная плоскость разделяет диапазон на две части:

а) область $\theta < \pi/2 - |\varphi|$ соответствует зеленым лучам (зеленый веер падающих и отраженных лучей), т.е. фононам, которые после отражения распространяются внутри образца и непосредственно участвуют в рассеянии на шероховатой поверхности;

б) область $\theta > \pi/2 - |\varphi|$ соответствует красным лучам (падающим и отраженным), которые не могут существовать внутри образца и их необходимо исключить. Данный случай проиллюстрирован также на рис. **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, где построена касательная плоскость под углом φ и луч, характеризующий направление распространения отраженного фонона, под углом отражения ψ , который выходит за пределы образца (в прочем, как и угол падения θ).

Случай 2 – затенение, когда фонон отражается внутрь неровности, а не вглубь образца (иллюстрация на рис. 3.10). При этом фонон многократно взаимодействует с шероховатостью, прежде чем ее покинуть. Это возможно при углах отражения $\psi > \pi/2$.

Обратим внимание на несколько особенностей. Во-первых, в результате многократных взаимодействий фонон будет отражен от профиля вглубь образца, но не из точки падения А, а из точки В, смещенной вдоль профиля поверхности. Во-вторых, итоговый угол отражения от шероховатой поверхности нельзя определить без знания закона изменения профиля поверхности.

Проиллюстрируем результаты анализа на диаграмме углов отражения (рис. 3.11). На диаграмме представлены следующие области:

область 1 – ниже синей линии – ($\theta > \varphi + \pi/2$) нефизичная область углов, когда отраженный фонон выходит за пределы образца (иллюстрация на рис. 3.8);

область 2 – между синей и красной линиями – область затенения, когда угол отражения $\psi > \pi/2$, а фононы многократно переотражаются от шероховатой поверхности;

область 3 – между черной и красной линиями – когда фононы отражаются в направлении распространения потока;

область 4 – выше черной линии – когда фононы отражаются против направления потока.

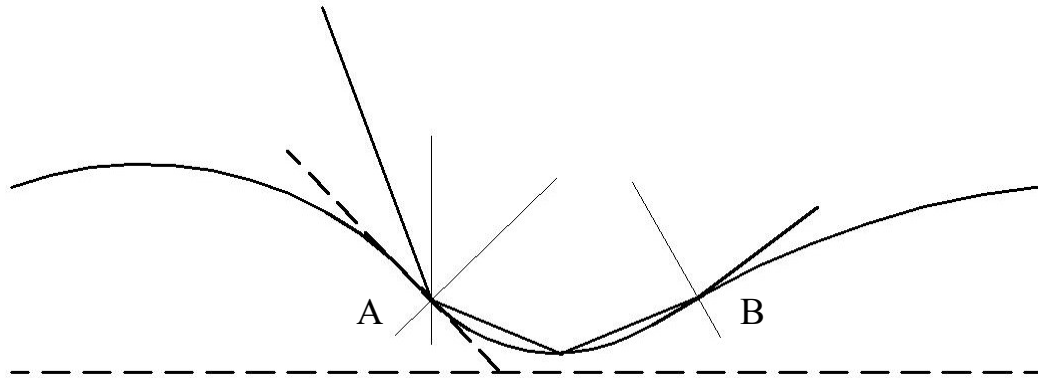


Рисунок 3.10. Визуализация участка затенения, когда фонон испытывает многократное переотражение прежде, чем вернуться вглубь образца.

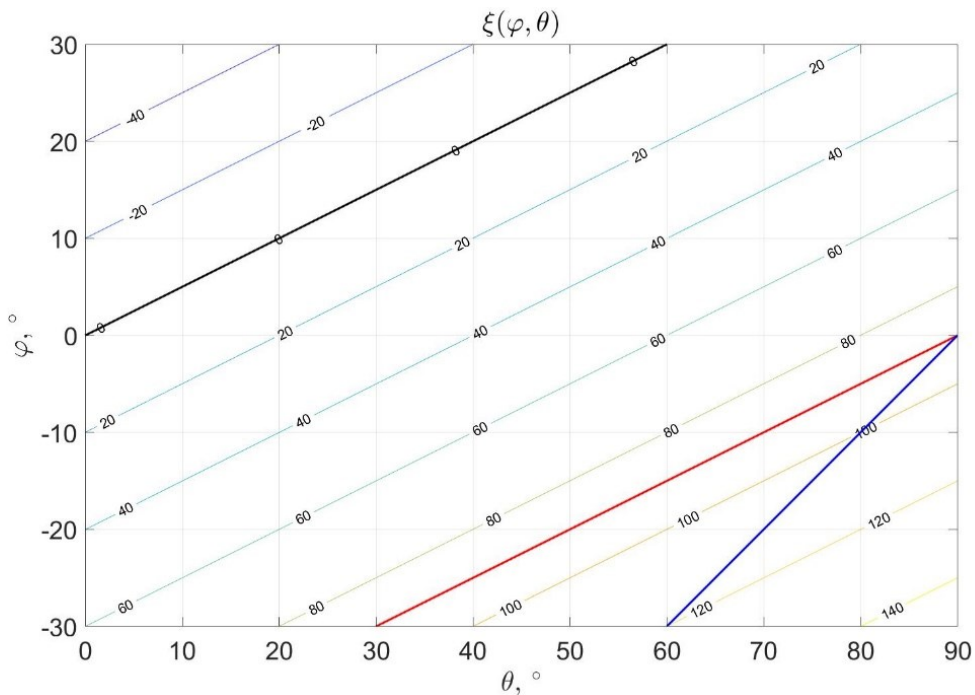


Рисунок 3.11. Значения углов отражения $\psi = \theta - 2\varphi$ от шероховатой поверхности в зависимости от угла падения θ и угла наклона профиля φ . Области на диаграмме: нефизичная область 1 – ниже синей линии; область 2 затенения, между красной и синей линиями, когда фононы многократно отражаются от шероховатости.

Теперь перейдём к рассмотрению математической модели, которая позволит учесть ограничения, накладываемые на допустимый диапазон углов падения и отражения.

Случай 1, когда направление распространения отраженного фона происходит за пределами рассматриваемого материала, т.е. когда $\theta > \pi/2 - |\varphi|$. Иллюстрация приведена на рис. 3.8.

Данная область углов нефизична, и в зависимости от угла наклона профиля φ (касательной плоскости) допустимый диапазон углов падения θ необходимо ограничить. Для этого применим функцию Хевисайда и получим так называемое усеченное нормальное распределение

$$w_{\theta}(\varphi, \theta, \gamma) = \frac{w(\varphi, \gamma) H_{\theta}(\varphi, \theta)}{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} w(\varphi, \gamma) H_{\theta}(\varphi, \theta) d\varphi}, \quad H_{\theta}(\varphi, \theta) = H\left(\varphi + \frac{\pi}{2} - \theta\right) \quad (3.14)$$

Отличительная особенность усеченного распределения заключается в том, что в нем напрямую исключается участок затенения и рассматривается только допустимая область изменения углов. Таким образом для учета затенения достаточно в выражении (3.8) вместо функции $w(\varphi, \gamma)$ (3.2) использовать $w_{\theta}(\varphi, \gamma)$ (3.14), а расчетное выражение для среднеквадратичного угла отражения примет форму

$$\langle \psi^2 \rangle(\theta, \gamma) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \psi^2(\varphi, \theta) w_{\theta}(\varphi, \gamma) d\varphi. \quad (3.15)$$

На рис. 3.12 представлены результаты расчета $\langle \psi^2 \rangle(\theta, \gamma)$ без учета затенения (3.8) и с его учетом (3.15). Видно, что затенение играет роль при значительных углах падения и высокой неоднородности поверхности (при росте γ).

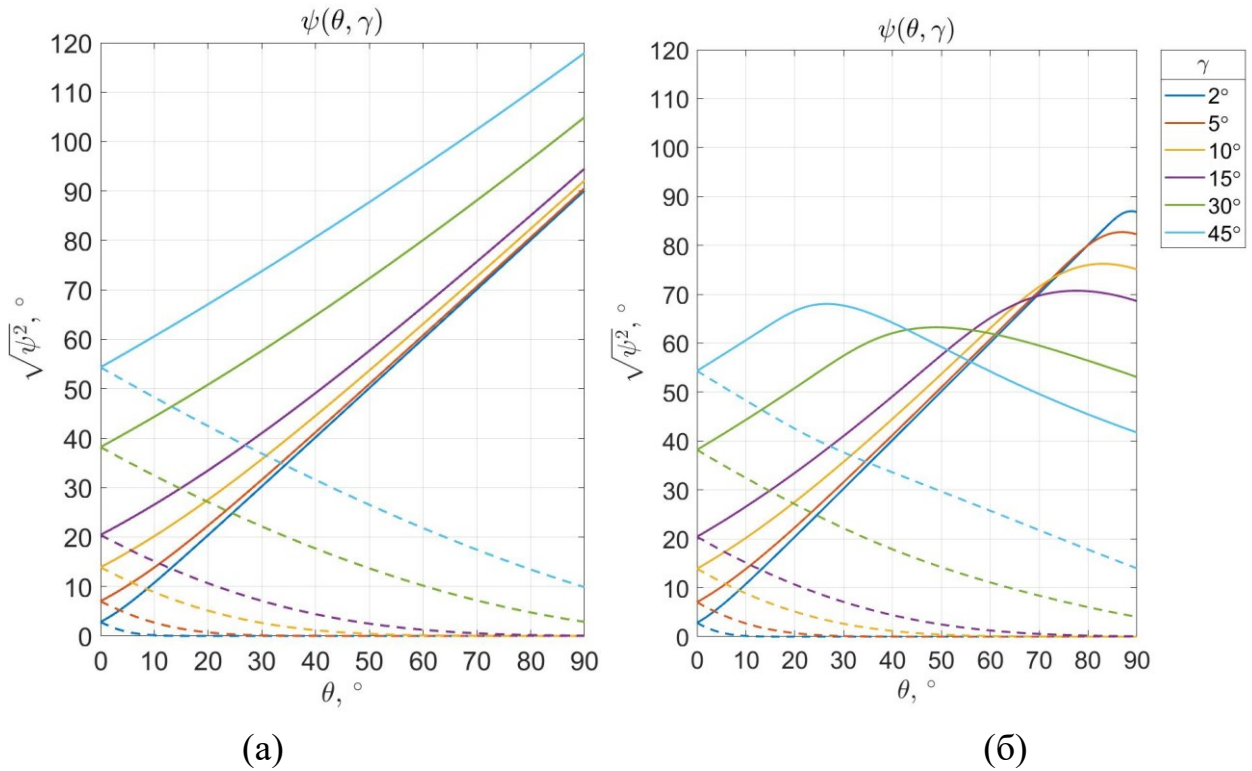


Рисунок 3.12. Значение среднеквадратичного угла отражения $\sqrt{\langle \psi^2 \rangle}$ для потоков фононов I_+ и I_- в зависимости от угла падения θ и градиентов наклона профиля γ . Рассмотрены два случая: (а) без учета затенения, (б) с учетом затенения. Сплошные линии соответствуют ψ_+ , а штриховые – ψ_- .

Случай 2, когда фононы претерпевают многократное взаимодействие с шероховатой границей прежде, чем отразиться вглубь образца. Иллюстрация приведена на рис. 3.10. Данный случай отражения возможен при углах отражения $\psi > \pi/2$.

Данный случай ясен с геометрической точки зрения, но физика взаимодействия фононов требует дальнейшего анализа, так как необходимо увязать область, где происходят переотражения с характерным линейным размером – длиной волны фонона λ . Поэтому вместо угла $\sqrt{\langle \psi^2 \rangle}$ определим долю фононов δ_{sh} (shading), участвующих в многократных переотражениях. Для этого воспользуемся подходом (3.4)-(3.7) для области затенения 2 (рис. 3.4). Результаты расчета представлены на рис. 3.13. Обратим внимание, что δ_{sh} является частью δ_+ ,

и роль δ_{sh} увеличивается при возрастании среднеквадратичного градиента поверхности γ . Видно, что при малых γ затенения оказывают влияние при углах падения близких к 90° , т.е. при скользящих углах.

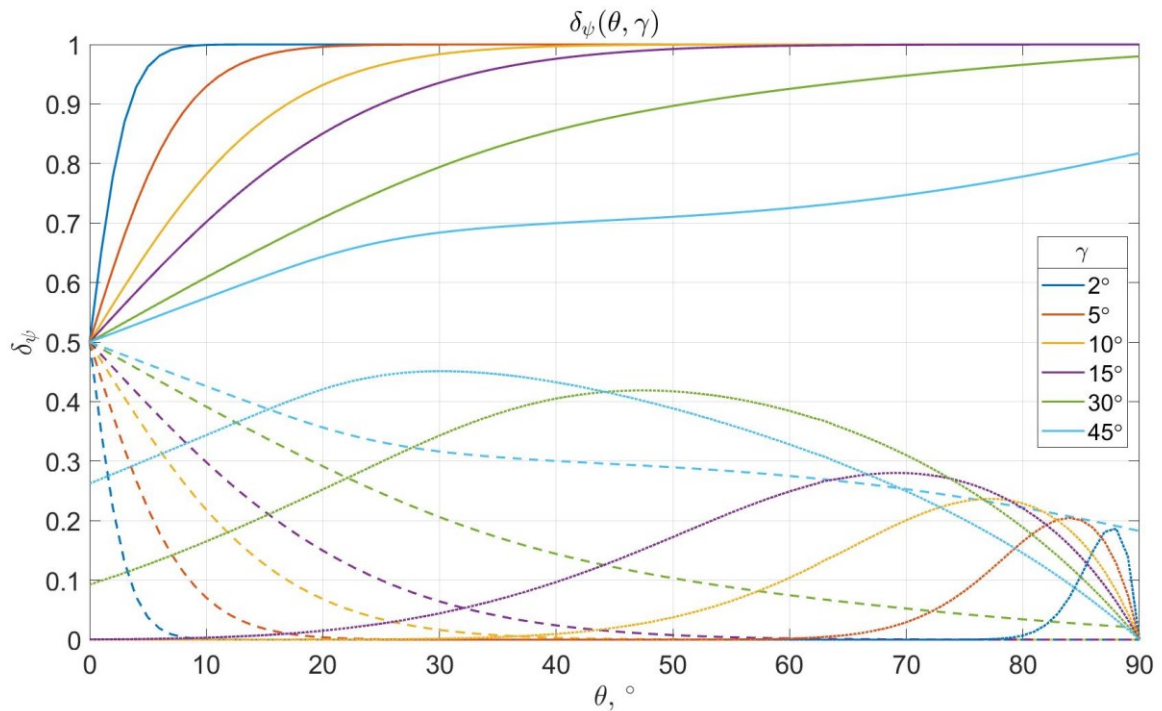


Рисунок 3.13. Доли фононов δ_+ отраженных вдоль направления распространения (сплошные линии) и δ_- – против направления распространения (штриховые линии); δ_{sh} – доли фононов, участвующих в многократном переотражении от шероховатости (пунктирные линии в нижней части графика), являются частью δ_+ .

3.3. Расчет длины пробега баллистических фононов

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

$$l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) = \frac{L}{\cos(\theta - 2\varphi)}. \quad (3.16)$$

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

Следующий шаг – учет шероховатости границы. Для этого воспользуемся функцией распределения углов наклона (3.2) и определим среднюю длину свободного пробега l_b между взаимодействиями фононов с шероховатой границей, осредненную по углам наклона поверхности образца (шероховатостям)

$$l_b(\gamma, \theta, L) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} w_{\theta}(\varphi, \gamma) l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) d\varphi. \quad (3.17)$$

После подстановки (3.16) в (3.17) получаем итоговое расчетное выражение

$$l_b(\gamma, \theta, L) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} w_{\theta}(\varphi, \gamma) \frac{L}{\cos(\theta - 2\varphi)} d\varphi = L b_s(\gamma, \theta), \quad (3.18)$$

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

$$b_s(\gamma, \theta) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} \frac{w_{\theta}(\varphi, \gamma)}{\cos(\theta - 2\varphi)} d\varphi. \quad (3.19)$$

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. Для этого можно сформулировать ограничение на углы следующим образом. Пусть длина пластины L_x превосходит толщину L_z в n_{xz} раз: $L_x = n_{xz} L_z$. Тогда для предельного угла отражения и предельной длины пробега получаем

$$\tan \psi_{\max} = \frac{L_z}{L_x} = n_{xz}^{-1} \text{ и } l_{b,\max} = \frac{L_z}{\cos \psi_{\max}} \quad (3.20)$$

Также отдельно требуется рассмотреть третью причину. Так при попадании фонона в область влияния шероховатости (рис. 3.10) с фононом происходит процесс подобный интерференции, что требует более детального учета отражения от границы. Здесь отметим, что данная особенность имеет место, когда в соответствии с диаграммой на рис. 3.11, угол отражения попадает в область между красной и синей линиями. Исключение данной области из рассмотрения происходит путем введения ограничения на диапазон рассматриваемых углов с помощью функции Хевисайда, аналогично усеченной функции распределения (3.14)

$$H_{\theta,\max}(\varphi, \theta) = H \left[\frac{\pi}{2} - (\theta - 2\varphi) - \psi_{\max} \right] \quad (3.21)$$

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 (3.18) и длиной пробега, соответствующей внутренним процессам взаимодействия фононов.

Результаты расчета форм-фактора (3.19) представлены на рис. 3.14. 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 γ зависимость форм-фактора меняется. Так при малых углах падения θ значение b_s постоянно и слабо зависит от γ , 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 γ фононы чаще сталкиваются с границей образца, поэтому значение b_s растёт 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.

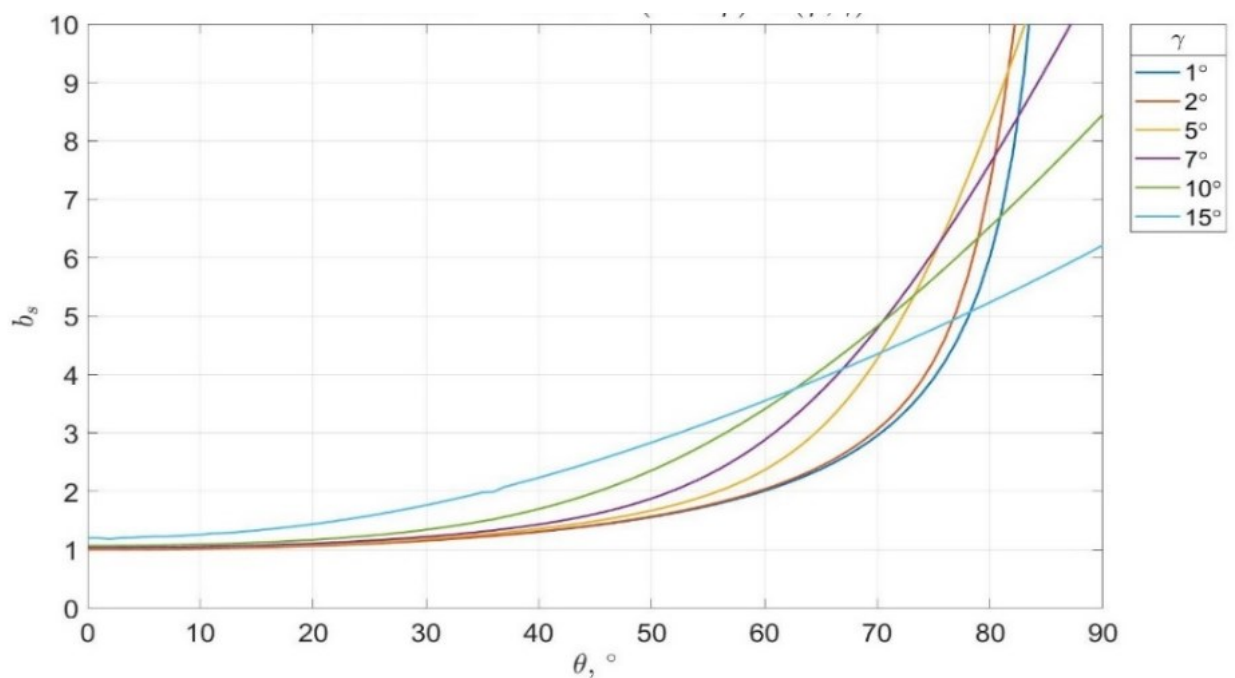


Рисунок 3.14. Зависимость форм-фактора (3.19) от угла падения θ и градиентов наклона профиля γ .

Выводы по главе 3

1. 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.

2. Отмечен ряд принципиальных отличий от существующих моделей. Во-первых, это учет влияния углов наклона 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 [2]; но и установить влияние «относительно крутых» шероховатостей, что, как показывают эксперименты [1], имеет место для случая атомарной шероховатости в наноструктурах.

3. Продемонстрировано применение разработанного метода для расчета длин свободного пробега фононов между последовательными взаимодействиями с границей твердого тела.

4. Разработанная модель шероховатой границы и сведение задачи рассеяния фононов к задаче отражения упругих волн были успешно применены в работах по расчету контактного термического сопротивления [19–22].

Глава 4. Обновленная модель расчета эффективной теплопроводности нанопленок

4.1. Модель расчета теплопроводности нанопленок

4.1.1. Учет размерного эффекта

При рассмотрении свойств ограниченных структур (пленок, нитей и пр.) необходимо принимать во внимание размерный эффект. Так для пленок необходимо применять дискретизацию возможных значений проекции волнового вектора на поперечное направление. Поэтому вместо интегрирования по k -пространству перейти к сумме по конечному числу состояний. Для этого воспользуемся методом учета классического размерного эффекта [91,92]

1) Вывод выражения для учета числа состояний в k -пространстве для bulk 3D в сферической СК.

Элемент объема k -пространства в сферических координатах

$$d^3\mathbf{k} = k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi \quad (4.1)$$

Тогда выражение для числа состояний можно преобразовать к известному виду

$$\int_{\mathbf{k}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k^2 dk = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{k^2}{2\pi^2} dk = \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \text{DOS}_{3D}(k) dk \quad (4.2)$$

где $\text{DOS}_{3D} = k^2 / (2\pi^2)$ – функция плотности состояний макроскопического образца.

2) Получим выражение для суммирования в k -пространстве с учетом размерного эффекта

Рассматривается тонкая пленка толщиной $L_z \ll \{L_x, L_y\}$, где z – направление поперек пленки, а x, y – направления вдоль пленки (см. рис. 4.1). Так как наименьшая возможная длина волны фонона, укладываемая поперек пленки,

соответствует $\lambda_{\min,z} = L_0 \sim a$, где a - параметр решетки; а максимальная $\lambda_{\max,z} = L_z$, то поперек пленки возможен лишь конечный набор волновых чисел

$$k_z = 0, \pm 2\pi / L_z, \pm 4\pi / L_z, \dots \quad (4.3)$$

Обратим внимание, что шаг изменения k_z кратен $\Delta k_z = 2\pi / L_z$, т.е. наименьшему волновому числу (для наибольшей длины волны). Количество q волновых чисел k_z определяется из соотношения $L = qL_0$. Также величина q соответствует числу моноатомных слоев (monoatomic layers):

$$k_z = \begin{cases} 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{(q-1)\pi}{L}, & q = 1, 3, 5, \dots \\ 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{(q-2)\pi}{L}, + \frac{q\pi}{L} & q = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (4.4)$$

В продольном направлении значения длин волн фононов считаем «неограниченными» (на самом деле значения ограничены характерным размером образца в планарном направлении), таким образом $\Delta k_{x,y} \ll \Delta k_z$. Поэтому, во-первых, для расчета числа возможных состояний используется суммирование в поперечном направлении и интегрирование в планарном направлении. Во-вторых, вместо интегрирования в прямоугольной системе координат воспользуемся полярной

$$\int_{\mathbf{k}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k_z} \left(\int_{k_x, k_y} dk_x dk_y \right) \Delta k_z = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k_z} \left(\int_0^{2\pi} \int_{\sqrt{k_{\min}^2 - k_z^2}}^{\sqrt{k_{\max}^2 - k_z^2}} k_{\parallel} dk_{\parallel} d\varphi \right) \Delta k_z \quad (4.5)$$

В качестве пределов интегрирования будут выступать максимальное и минимальное значения проекции волнового вектора $k_{\parallel} = \sqrt{k^2 - k_z^2}$. Обратим внимание, что пределы интегрирования будут изменяться в зависимости от текущего значения k_z при суммировании.

Далее продифференцируем выражение $k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2$ и установим связь между волновым числом k и его проекцией на плоскость вдоль пленки k_{\parallel} :

$$kdk = k_{\parallel}dk_{\parallel} \quad (4.6)$$

Полученное выражение позволяет перейти от интегрирования по k_{\parallel} к интегрированию по k :

$$\int_{\mathbf{k}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k_z} \left(\int_0^{2\pi} \int_{\sqrt{k_{\min}^2 - k_z^2}}^{\sqrt{k_{\max}^2 - k_z^2}} k_{\parallel} dk_{\parallel} d\varphi \right) \Delta k_z = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k_z} \left(\int_0^{2\pi} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k dk d\varphi \right) \Delta k_z. \quad (4.7)$$

В результате интегрирования по углу φ окончательно получаем:

$$\int_{\mathbf{k}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{\Delta k_z}{(2\pi)^2} \sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}(k_z)}^{k_{\max}} k dk \right). \quad (4.8)$$

Для проверки полученного выражения рассмотрим предельный случай, когда $\Delta k_z \rightarrow 0$, а суммирование по k_z переходит в интегрирование. Для этого свяжем проекцию волнового числа k_z с волновым числом k через азимутальный угол θ :

$$k_z = k \cos \theta, \quad dk_z = k \sin \theta d\theta, \quad (4.9)$$

и подставим (4.9) в выражение (4.8):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{k}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k_z} \left(\int_0^{2\pi} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k dk d\varphi \right) \Delta k_z \xrightarrow{\Delta k_z \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left(\int_0^{2\pi} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k dk d\varphi \right) k \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \end{aligned} \quad (4.10)$$

Таким образом, получили предельный переход к функции плотности состояний DOS для макроскопического образца, см. выкладки (4.2).

Теперь применим выражение (4.8) для тонкой пленки для расчета среднего некоторой функции $\bar{g}(L_z)$:

$$\bar{g}(L_z) = \frac{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} g(k) f_{BE}[\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z}{\sum_{k_z} \left(\int_{k_{\min}}^{k_{\max}} f_{BE}[\omega_j(k), T] k dk \right) \Delta k_z} \quad (4.11)$$

В полученном выражении информация об угле скрыта в проекции волнового вектора на поперечное направление z , а взаимосвязь устанавливается через соотношение $k_z = k \cos \theta$. Таким образом в исходном выражении для p необходимо выполнить переход от угла θ к проекции k_z .

Остановимся на особенностях полученного выражения. Во-первых, Δk_z в числителе и знаменателе можно сократить, т.к. $\Delta k_z = \text{const}$. Во-вторых, суммирование идет только по неотрицательным значениям k_z . В-третьих, существует прямая зависимость нижнего предела интегрирования k_{\min} от текущего значения k_z , что наглядно проиллюстрировано на рис. 4.1. Видно, что максимальное значение волнового числа соответствует k_{\max} , а минимальное k_z

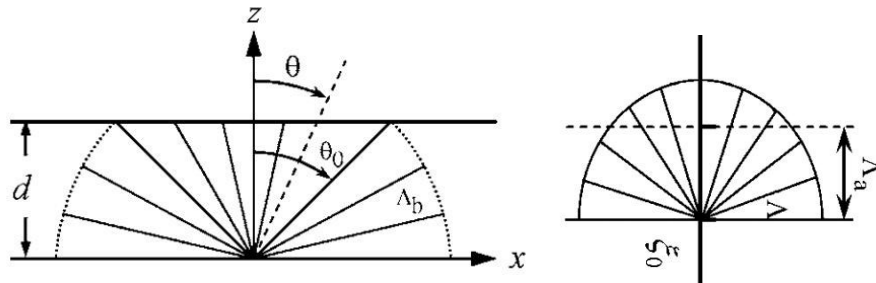


Рисунок 4.1. Иллюстрация для определения допустимых значений волнового числа k при фиксированном значении k_z

4.1.2. Расчетное выражение для эффективной теплопроводности

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

$$k_{in-plane}(L_z, T, \gamma, j) = \sum_{k_z} \left(\int_{k_{min}}^{k_{max}} C_{ph}[\omega_j(k), T] v_{g,j}(k) l_b[\gamma, \theta(k, k_z), L_z] \frac{k dk}{6\pi^2} \right) \Delta k_z, \quad (4.12)$$

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

где ω – 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; θ – угол наклона падающей волны; l_j – длина свободного пробега фононов. Обратим внимание, что выражение (4.12) в предельном случае $L_z \rightarrow \infty$ переходит в известное выражение для теплопроводности изотропного макроскопического образца.

Подчеркнём принципиальные отличия выражения (4.12) 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 (4.12) проводится непосредственное суммирование по разрешенным волновым числам в поперечном направлении, k_z . Именно поэтому интеграл (4.13) 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 (4.12) путем рассмотрения проекции волнового вектора на направление вдоль пленки. Более того, можно обобщить выражение провести (4.12) на случай расчета эффективной теплопроводности поперек плёнки путем рассмотрения проекция на поперечное направление.

4.2. Результаты расчета эффективной теплопроводности вдоль пленок кремния

4.2.1. Теплопроводность макроскопического образца

Для проверки точности обновленной модели проводится расчет теплопроводности образца кремния с естественным содержанием изотопов (рис. 4.2). Результаты расчета сопоставлены с известными экспериментальными данными [21,22].

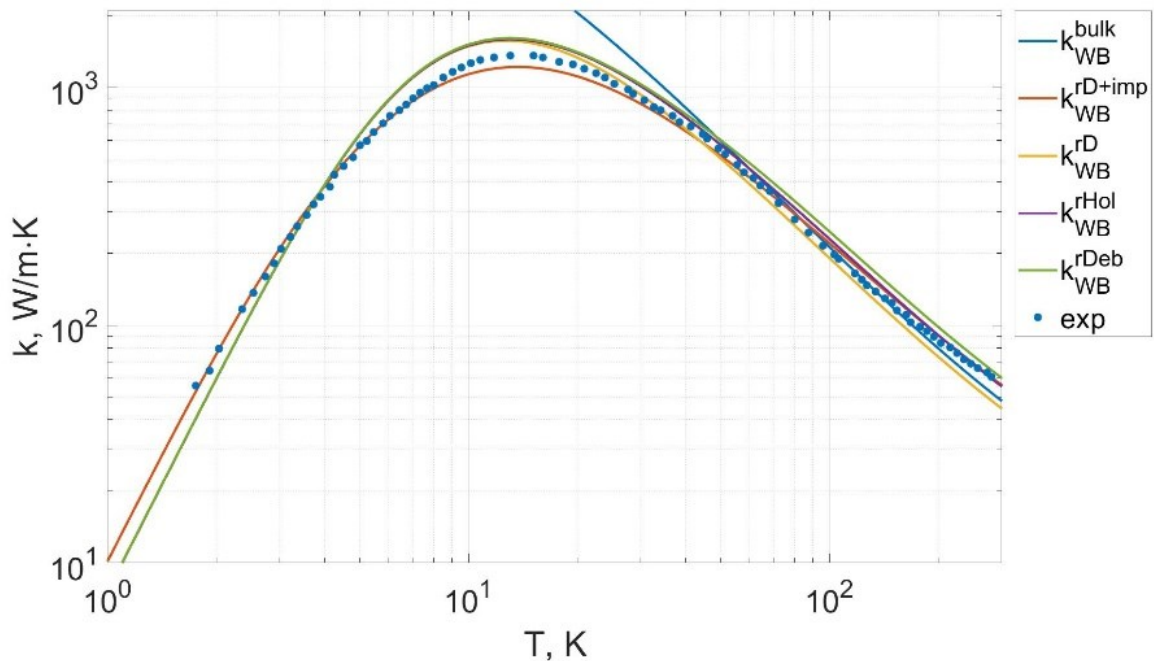


Рисунок 4.2. Теплопроводность германия с естественным содержанием изотопов (36,5% ^{74}Ge + 27,4% ^{72}Ge + 20,5% ^{70}Ge + 7,8% ^{73}Ge + 7,8% ^{76}Ge): k_{WB}^{bulk} – расчет проведен с использованием фонон-фононных времен взаимодействия согласно модели Ворда-Бройдо. k_{WB}^{rD+imp} – тоже, с учетом реальной дисперсии фононов при расчете рассеяния на изотопах по формуле (8). Далее представлены результаты при учете рассеяния на примесях (7) и на границах образца с учетом следующих законов дисперсии: k_{WB}^{rD} – аппроксимация реальных дисперсионных соотношений (12,13), k_{WB}^{rHol} – двулинейная модель Холленда (4), k_{WB}^{rDeb} – модель с постоянной скоростью. Точки соответствуют экспериментальным данным из работы [21].

Рисунок 4.2 дает представление о характерной для полупроводниковых материалов зависимости теплопроводности от температуры. Как видно из сопоставления разных аппроксимационных зависимостей для дисперсионных соотношений ошибка в определении теплопроводности лежит в пределах 10-15%. Анализ представленных приближений позволяет явно выделить ряд областей: область температур во много ниже температуры Дебая, где определяющую роль играют процессы рассеяния на границах образца (ниже 10 К) и на изотопах (от 10 до 50 К), и область температур порядка температуры Дебая и выше, где основную роль играют процессы фонон-фононных взаимодействий (более 50 К).

Для рассмотрения теплопроводности при температурах Дебая и выше рассмотрим образец кремния с естественным содержанием примесных атомов из работы [22] и сопоставим с экспериментальными данными [22].

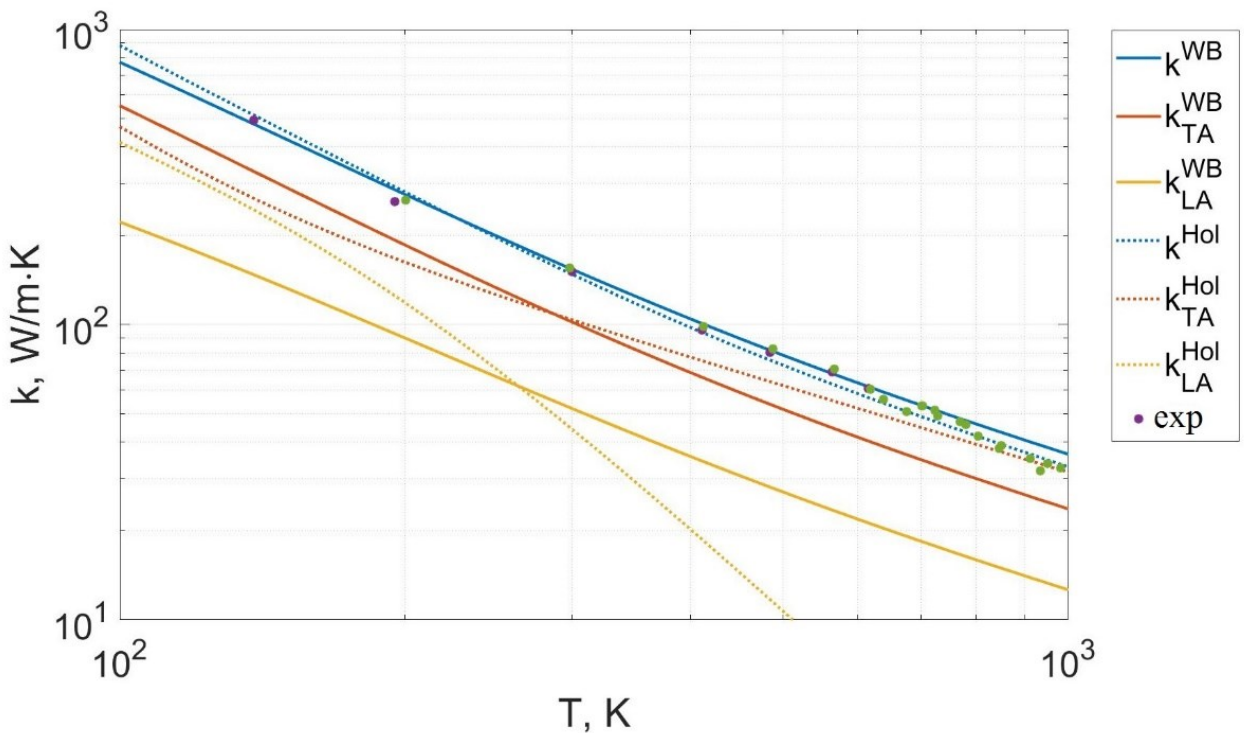


Рисунок 4.3. Теплопроводность кремния: сопоставление модели авторов k^{WB} и модели Холленда k^{Hol} (4,5) с экспериментальными данными [22] (точки). Индексы соответствуют поляризации: LA – продольная, TA – поперечная.

Результаты расчета, представленные на рисунок 3.5, показывают принципиальную особенность модели Холленда: переоценка роли поперечных волн в процессах фонон-фононных взаимодействий. Это обстоятельство не

приводит к ошибке в определении теплопроводности, но занижает вклад продольных волн. В этом заключается один из негативных аспектов подгоночного характера модели Холленда, который не дает возможности производить адекватную оценку вклада отдельных волн, а также создает ложное впечатление о применимости модели к расчету любых полупроводниковых структур (от макро до микро и нано).

4.2.2. Расчет теплопроводности пленок с использованием параметра зеркального отражения

Для проверки точности обновленной модели и демонстрации влияния размерного эффекта проводится расчет теплопроводности пленок кремния в диапазоне толщин от 10 нм до 100 мкм и диапазоне температур от 20 до 450 К. Результаты сопоставляются с известными экспериментальными данными [23-26].

Из выражения (1.96) следует, что размерный эффект влияет на:

1. дисперсию волн фононов через функцию плотности состояний $D_0(\omega)$ и осредненную групповую скорость распространения фононов $\overline{v}_g(\omega)$,
2. процессы рассеяния фононов на границах (1.93) и изотопах (1.92).

На рисунке 4.44.4 представлена характерная зависимость теплопроводности полупроводниковых материалов от толщины пленки на примере кремния вдоль направления [100]. Из анализа графиков можно сделать вывод, что использование модели Холленда ведет, во-первых, к значительной неопределенности в результатах, так как появляется возможность за счет параметра зеркального отражения беспрепятственно варьировать величину теплопроводности в широких пределах (от минимума, представленного на рисунке, до 1), что позволяет подгонять получаемые результаты под любые экспериментальные данные. Применение модели авторов позволяет локализовать область возможной величины теплопроводности и получить более аккуратные оценки. Во-вторых, тангенс угла наклона теплопроводности по модели Холленда отличается от оценок более точных моделей (модель автора и модель Ашеги [23]) и экспериментальных данных [23], что свидетельствует о явном преимуществе учета реальных

дисперсионных соотношений и времен фонон-фононных взаимодействий «из первых принципов» без введения подгоночных параметров.

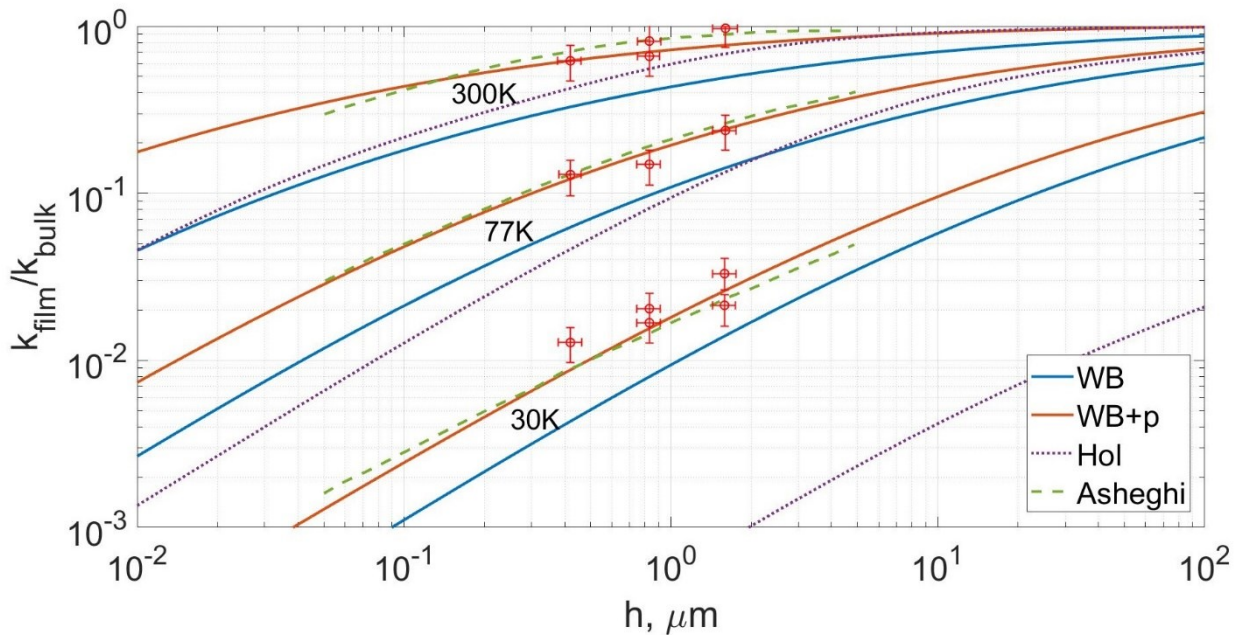
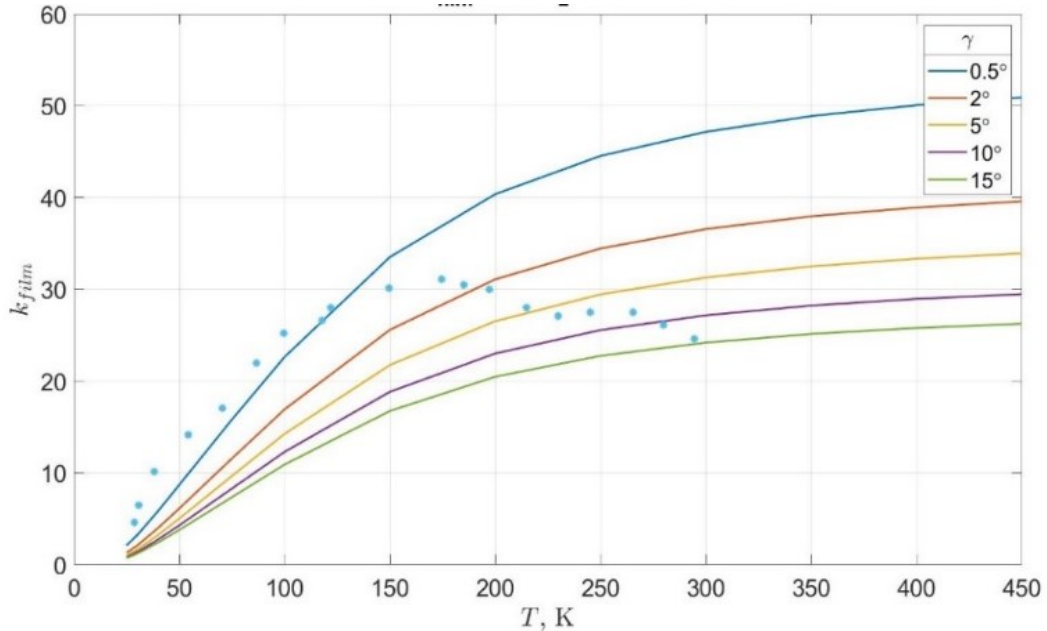


Рисунок 4.4. Теплопроводность пленок кремния вдоль направления в диапазоне толщин от 10 нм до 100 мкм: WB – модель авторов при условии диффузного отражения ($p=0$); WB – модель авторов для $p=0.4, 0.5$ и 0.8 для температуры $T=30$ К, 70 К и 300 К соответственно; Hol – модель Холленда (4,5) при $p=0$. Asheghi – модель расчета теплопроводности [23], основанная на преобразовании уравнения Больцмана с учетом размерного эффекта. Точки соответствуют экспериментальным данным [23].

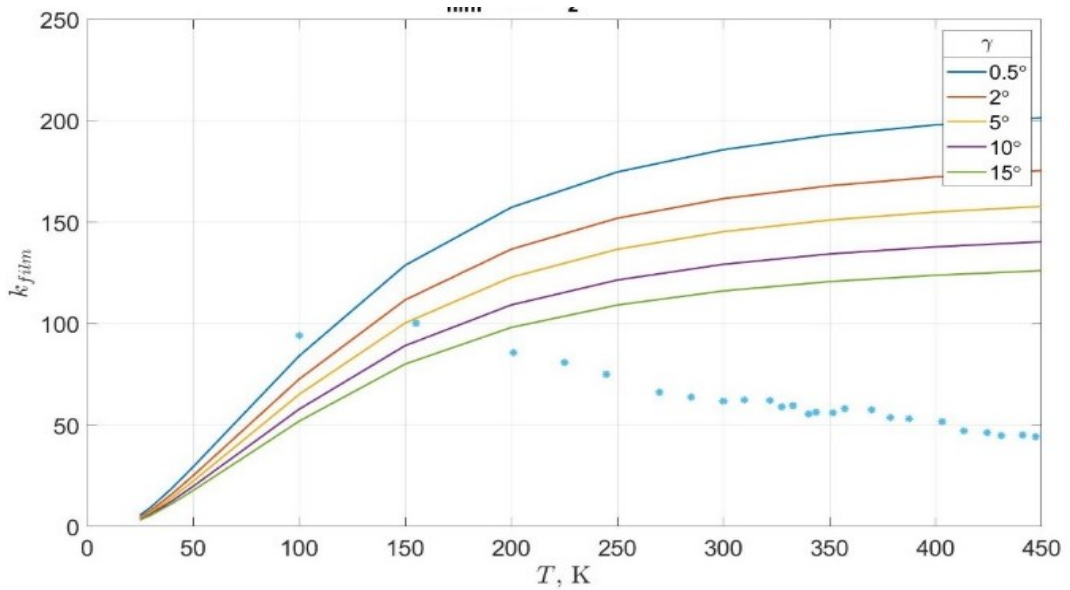
4.2.3. Результаты расчета теплопроводности в баллистическом режиме с использованием обновленной модели рассеяния фононов на шероховатой границе

Результаты расчета эффективной теплопроводности вдоль пленки кремния в квазиизотропном приближении представлены на рис. 4.5 и 4.6 и сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными. На рис. 4.5 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. 4.5 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.



(a)



(б)

Рисунок 4.5. 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 [66].

На рис. 4.6 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. 4.5 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.

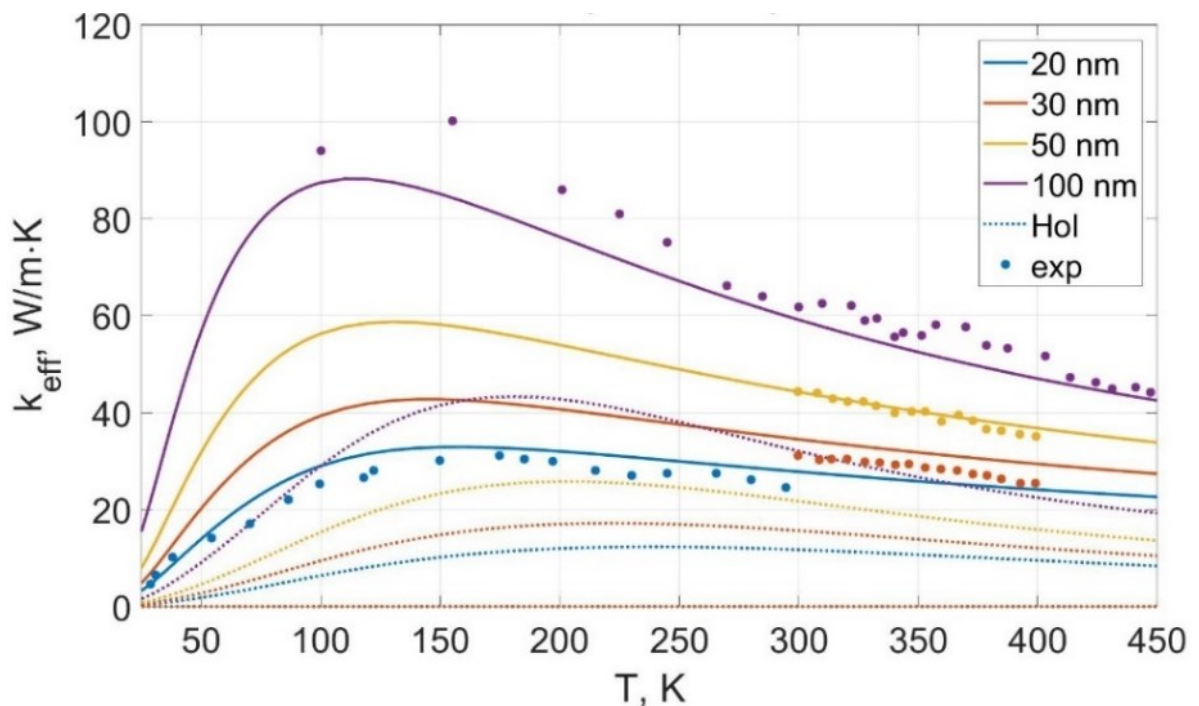


Рисунок 4.6. Эффективная теплопроводность вдоль пленки кремния. Сплошные линии – модель авторов; пунктирные линии – модель Фукса-Зондхаймера; точки - экспериментальные данные [65,66].

4.3. Влияние характерных геометрических параметров на теплопроводность пленок

Как отмечалось выше, шероховатая поверхность образца в сформулированной нами модели задается через среднеквадратичные градиенты наклона профиля поверхности. При этом средние углы наклона профиля связаны как с среднеквадратичной шероховатостью профиля (высоты шероховатости), так и длины корреляции (продольный параметр шероховатости). Из анализа известных экспериментальных работ задача об установлении влияния параметров шероховатости на эффективную теплопроводность ставился лишь для нанонитей. Для пленок таких работ нет. Более того, нет ответа о влиянии длины пленки на теплопроводность.

Поэтому здесь мы представим оценки для продольной теплопроводности пленок в зависимости от длины и толщины пленки, параметров шероховатости (длины корреляции и среднеквадратичной высоты), а также температуры. Введем величину $n_{xz} = L_x / L_z$, характеризующую соотношение между длиной пленки L_x и ее толщиной L_z .

Так на рис. 4.7 и 4.8 приведены расчетные значения эффективной теплопроводности пленок кремния при температуре 300К в зависимости от $n_{xz} = L_x / L_z$ для 4-х значений толщин L_z : 20, 30, 50 и 100 нм, и четырем градиентам наклона профиля шероховатой поверхности $\gamma = \sigma_{rms} / l_{cor}$. Аналогичные результаты, но для температуры 50К представлены на рис. 4.9 и 4.10.

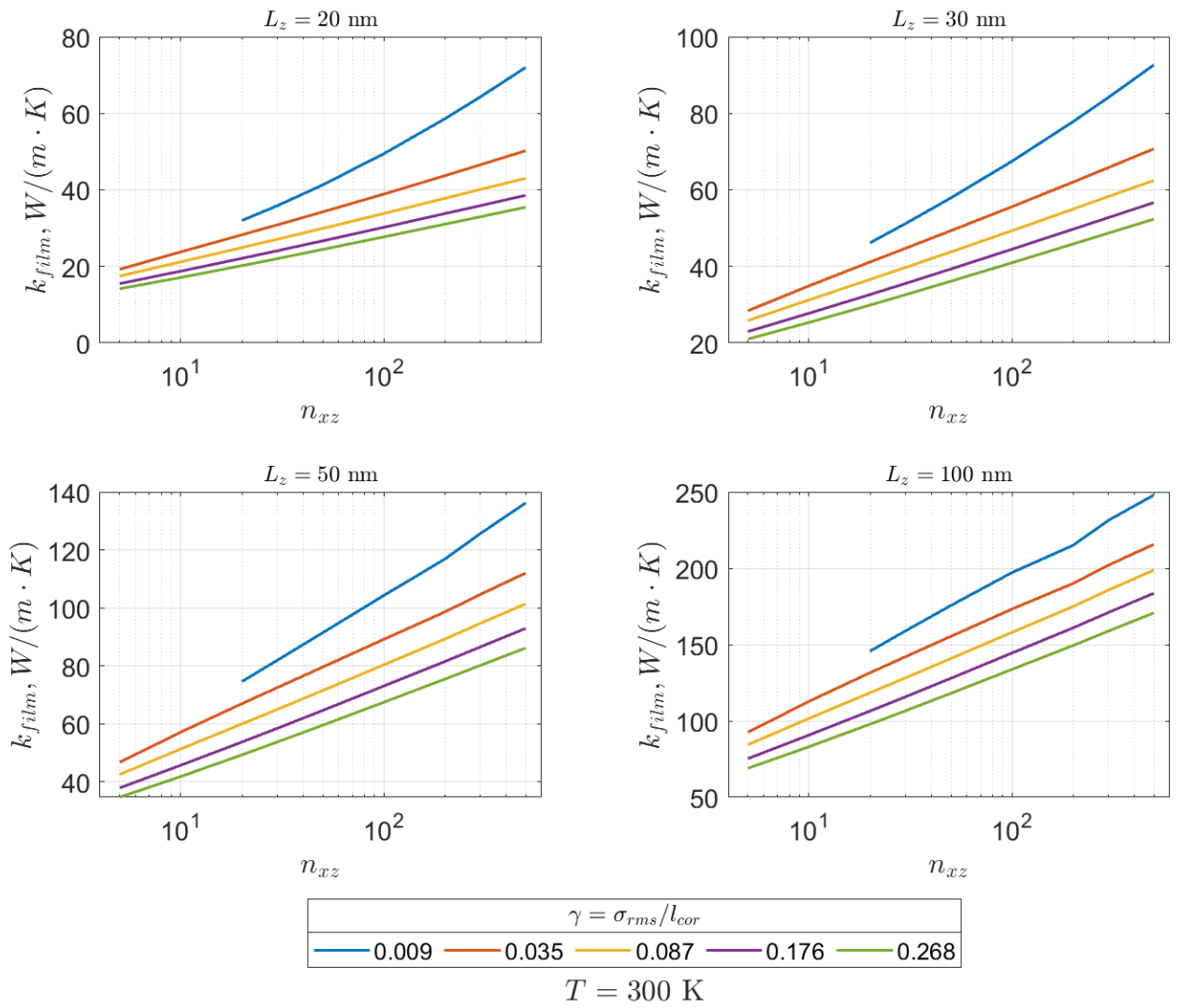


Рисунок 4.7. Эффективная теплопроводность вдоль пленки кремния при температуре 300К в зависимости от $n_{xz} = L_x / L_z$ для толщин L_z 20, 30, 50 и 100 нм. Линии соответствуют различным градиентам наклона профиля шероховатой поверхности $\gamma = \sigma_{rms} / l_{cor}$.

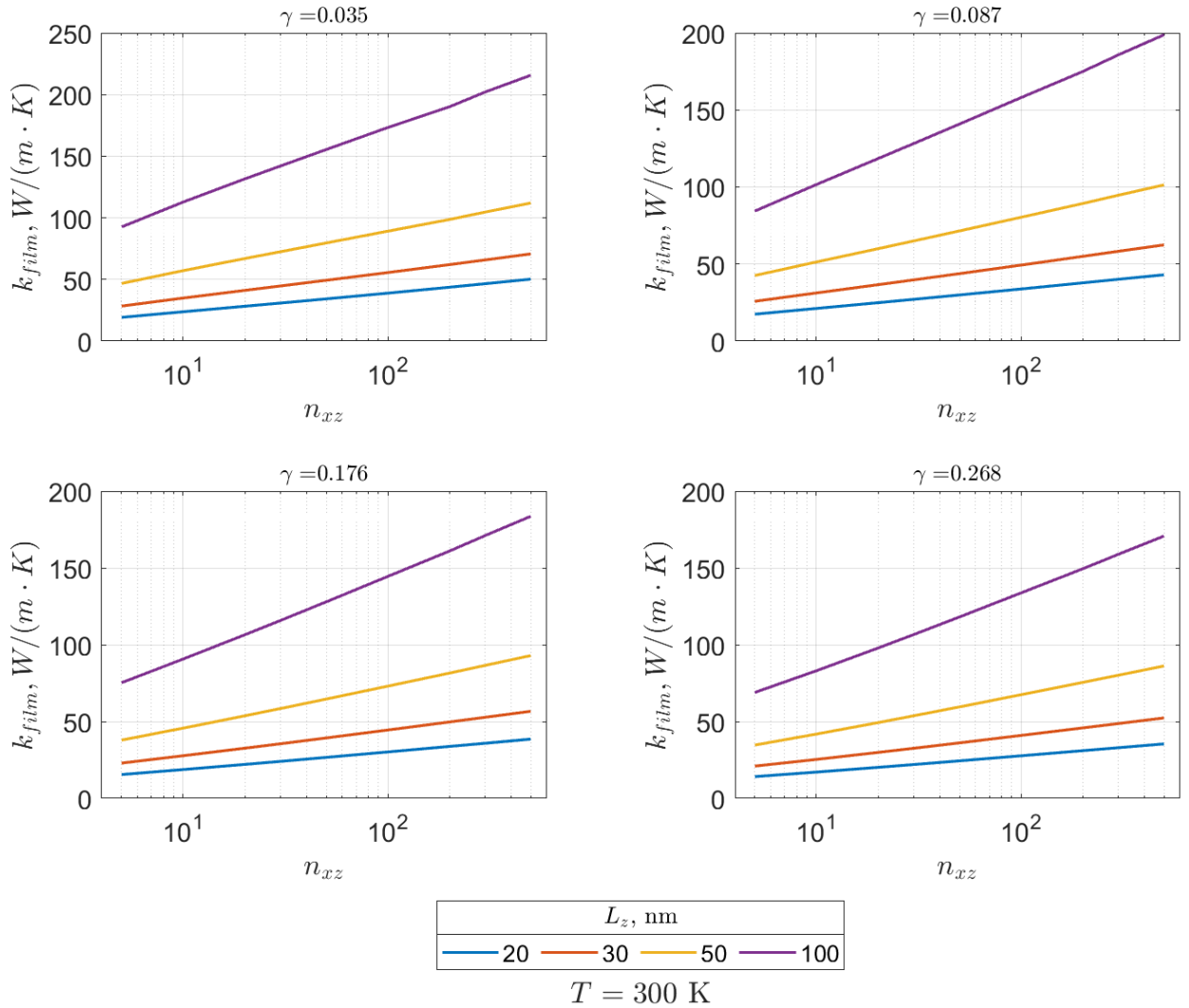


Рисунок 4.8. Эффективная теплопроводность вдоль пленки кремния при температуре 300К в зависимости от градиентов наклона профиля шероховатой поверхности $\gamma = \sigma_{rms} / l_{cor}$. Линии соответствуют различным значениям $n_{xz} = L_x / L_z$ для толщин L_z 20, 30, 50 и 100 нм.

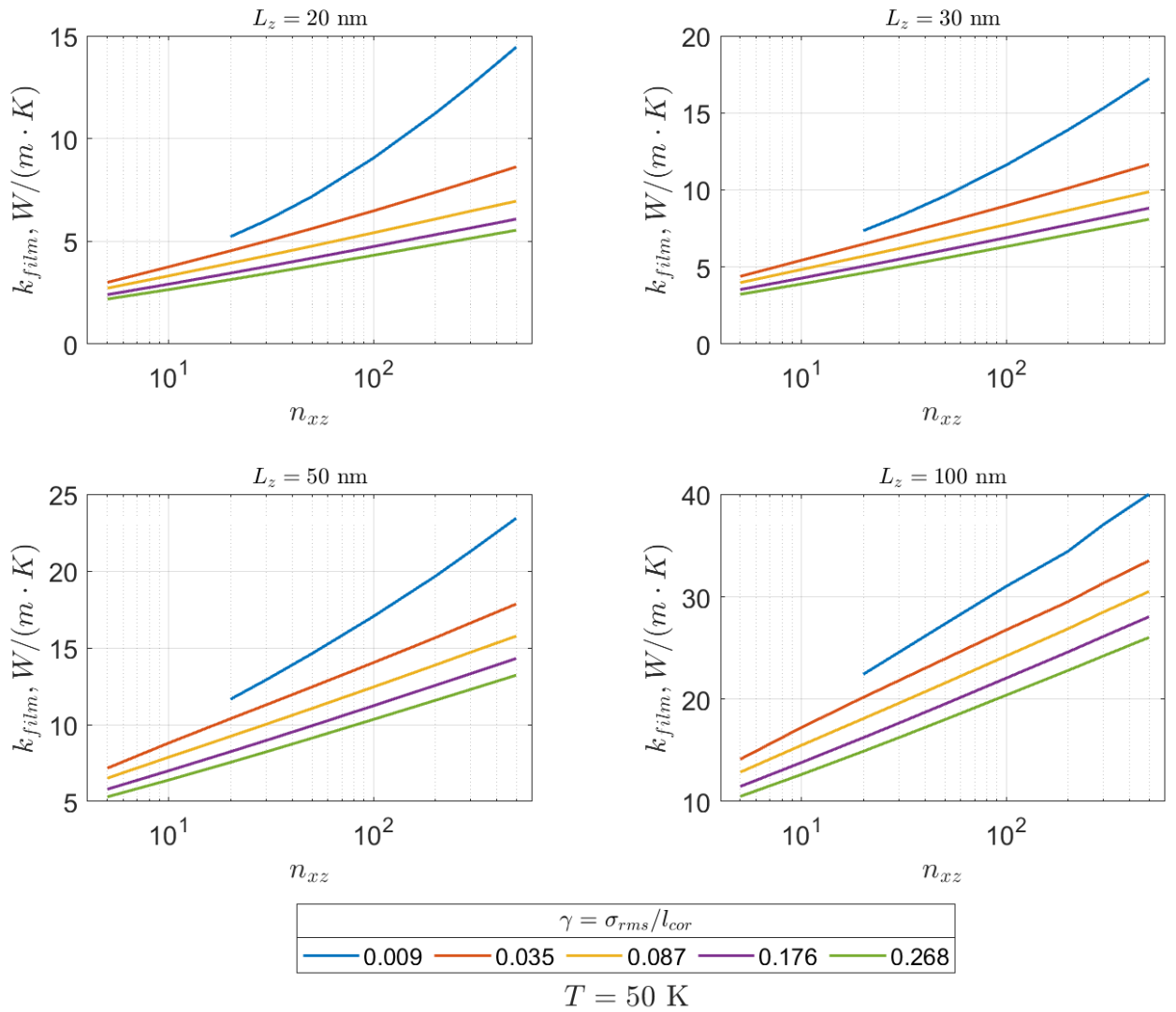


Рисунок 4.9. Эффективная теплопроводность вдоль пленки кремния при температуре 50К в зависимости от $n_{xz} = L_x / L_z$ для толщин L_z 20, 30, 50 и 100 нм. Линии соответствуют различным градиентам наклона профиля шероховатой поверхности $\gamma = \sigma_{rms} / l_{cor}$.

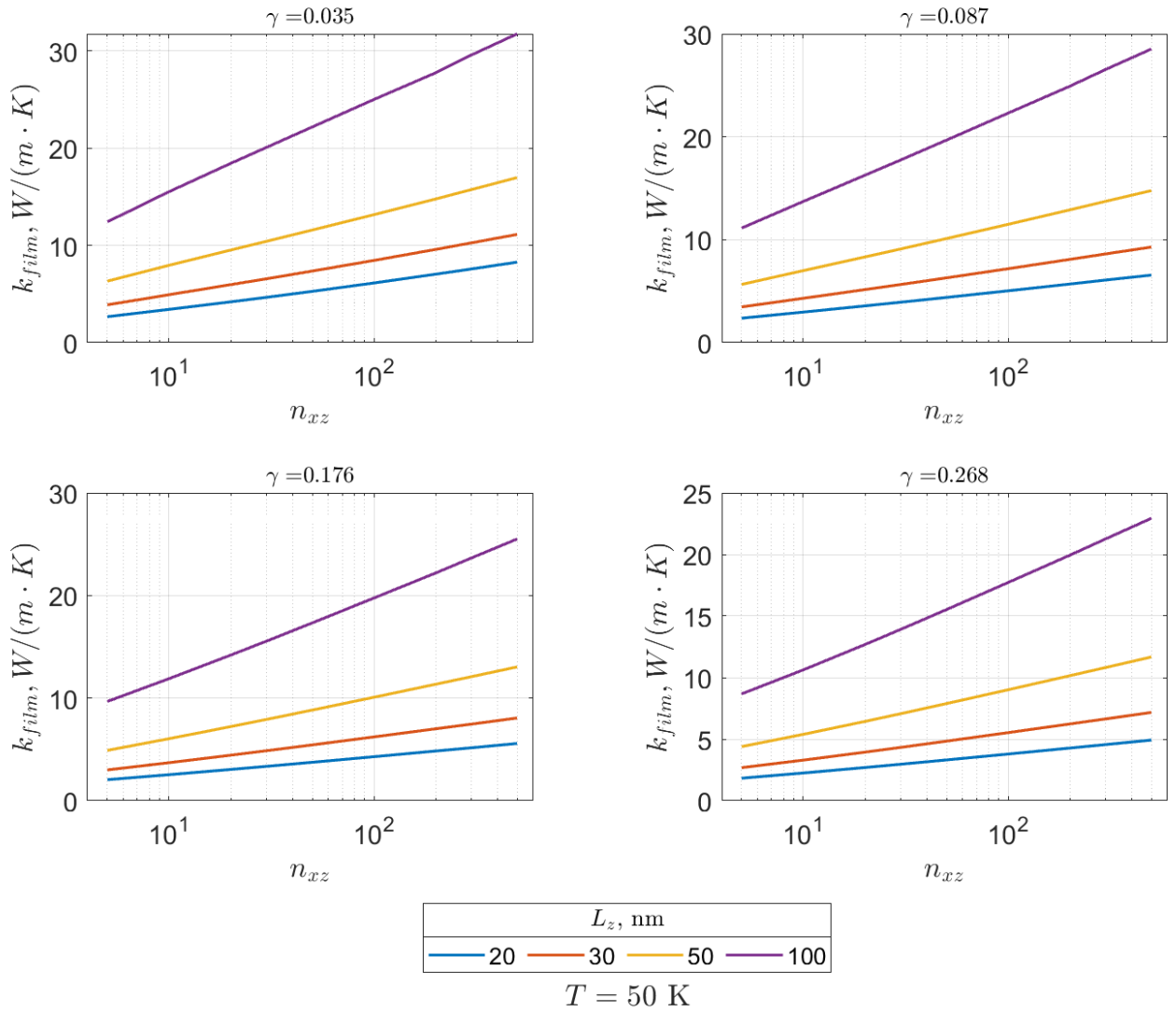


Рисунок 4.10. Эффективная теплопроводность вдоль пленки кремния при температуре 50К в зависимости от градиентов наклона профиля шероховатой поверхности $\gamma = \sigma_{rms} / l_{cor}$. Линии соответствуют различным значениям $n_{xz} = L_x / L_z$ для толщин L_z 20, 30, 50 и 100 нм.

Выводы по главе 4

1. Представлен новый метод расчета эффективной теплопроводности наноструктур на примере пленок с учетом толщины и длины образца

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

3. 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 ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lim J. et al. Quantifying Surface Roughness Effects on Phonon Transport in Silicon Nanowires // Nano Lett. 2012. V. 12, № 5. P. 2475–2482.
2. Soffer S.B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // J. Appl. Phys. 1967. V. 38, № 4. P. 1710–1715.
3. Barinov A., V T. Ballistic Thermal Transfer in Nanosystems // Sci. Educ. Bauman MSTU. 2016. V. 16, № 05.
4. Barinov A. et al. Development of In-plane Thermal Conductivity Calculation Methods in Thin Films // Sci. Educ. Bauman MSTU. 2017. V. 17, № 06. P. 56–71.
5. Khvesyuk V.I., Barinov A.A. Hierarchy of models for calculating the thermal conductivity in nanostructures // J. Phys. Conf. Ser. 2017. V. 891. P. 012352.
6. Баринов А.А. et al. Обновленная модель расчета теплопроводности тонких пленок кремния и германия // Ядерная Физика И Инжиниринг. 2018. V. 9, № 5. P. 433–444.
7. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A new look at Kapitza conductance calculation (thermal boundary resistance) // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1368, № 4. P. 042035.
8. 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. V. 1382, № 1. P. 012155.
9. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Analysis of diffusion processes in a phonon gas // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1382, № 1. P. 012156.
10. 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. V. 1368, № 4. P. 042051.
11. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. The effect of phonon diffusion on heat transfer // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1385, № 1. P. 012046.

12. Barinov A.A. et al. Updated Model for Thermal Conductivity Calculation of Thin Films of Silicon and Germanium // *Phys. At. Nucl.* 2020. V. 83, № 11. P. 1538–1548.
13. Khvesyuk V.I. et al. A review to the specific problems of nano thermal physics // *J. Phys. Conf. Ser.* 2020. V. 1683, № 2. P. 022073.
14. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A New Approach to Calculation of the Kapitza Conductance between Solids // *Tech. Phys. Lett.* 2020. V. 46, № 10. P. 983–987.
15. 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. V. 1565, № 1. P. 012025.
16. Liu B., Khvesyuk V.I. Analytical model for thermal boundary conductance based on elastic wave theory // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2020. V. 159. P. 120117.
17. Хвесьюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы между твердыми телами // *Письма В Журнал Технической Физики.* 2020. V. 46, № 19. P. 42.
18. Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. V. 2057, № 1. P. 012111.
19. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Generalized model of Kapitza conductance across rough interfaces // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. V. 2057, № 1. P. 012110.
20. Lyu B., Khvesyuk V.I., Barinov A.A. The Modeling of the Kapitza Conductance through Rough Interfaces between Solid Bodies // *Phys. Solid State.* 2021.
21. Лю Б., Хвесьюк В.И., Баринов А.А. Моделирование проводимости Капицы через шероховатые интерфейсы между твердыми телами // *Физика Твёрдого Тела.* 2021. V. 63, № 7. P. 982.
22. 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. V. 2150, № 1. P. 012021.
23. Liu B. et al. Effect of interfacial roughness on thermal boundary conductance: An elastic wave model using the Kirchhoff approximation // *Int. J. Mech. Sci.* 2022. V. 218. P. 106993.

24. Cahill D.G. et al. Nanoscale thermal transport // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 93, № 2. P. 793–818.
25. Cahill D.G. et al. Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 // *Appl. Phys. Rev.* 2014. V. 1, № 1. P. 011305.
26. Eletskaa A.V. et al. Thermophysical properties of nanoobjects: Data classification and validity evaluation // *High Temp.* 2012. V. 50, № 4. P. 488–495.
27. Khvesyuk V.I., Skryabin A.S. Heat conduction in nanostructures // *High Temp.* 2017. V. 55, № 3. P. 434–456.
28. Peierls R. Zur kinetischen Theorie der Wärmeleitung in Kristallen // *Ann. Phys.* 1929. V. 395, № 8. P. 1055–1101.
29. Klemens P.G. *Thermal Conductivity and Lattice Vibrational Modes* // *Solid State Physics*. Elsevier, 1958. V. 7. P. 1–98.
30. Kaviany M. *Heat Transfer Physics*. 2008. P. 685.
31. Alvarez F.X., Jou D. Size and frequency dependence of effective thermal conductivity in nanosystems // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103, № 9. P. 094321.
32. Zhu Y.F., Lian J.S., Jiang Q. Re-examination of Casimir limit for phonon traveling in semiconductor nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 92, № 11. P. 113101.
33. Dong Y., Cao B.-Y., Guo Z.-Y. Ballistic–diffusive phonon transport and size induced anisotropy of thermal conductivity of silicon nanofilms // *Phys. E Low-Dimens. Syst. Nanostructures*. 2015. V. 66. P. 1–6.
34. Li D. et al. Tunable anisotropic thermal conduction in graphane nanoribbons // *Appl. Phys. Lett.* 2014. V. 104, № 14. P. 143108.
35. Sussmann J.A., Thellung A. Thermal Conductivity of Perfect Dielectric Crystals in the Absence of Umklapp Processes // *Proc. Phys. Soc.* 1963. V. 81, № 6. P. 1122–1130.
36. Gurzhi R.N. Thermal Conductivity of Dielectrics and Ferrodielectrics at Low Temperatures // *JETP*. V. 19, № 2. P. 490.
37. Gurzhi R.N. Hydrodynamic effects in solids at low temperature // *Uspekhi Fiz. Nauk*. 1968. V. 94, № 4. P. 689–718.

38. Редько Н.А., Каган В.Д. Пуазейлево течение фононного газа висмута в условиях размерного эффекта // Физика Твёрдого Тела. V. 33, № 8. P. 2413–2417.
39. Guyer R.A., Krumhansl J.A. Solution of the Linearized Phonon Boltzmann Equation // Phys. Rev. 1966. V. 148, № 2. P. 766–778.
40. Guyer R.A., Krumhansl J.A. Thermal Conductivity, Second Sound, and Phonon Hydrodynamic Phenomena in Nonmetallic Crystals // Phys. Rev. 1966. V. 148, № 2. P. 778–788.
41. Ma Y. Size-dependent thermal conductivity in nanosystems based on non-Fourier heat transfer // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 101, № 21. P. 211905.
42. Guo Y., Wang M. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport // Phys. Rep. 2015. V. 595. P. 1–44.
43. Zou J., Balandin A. Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire // J. Appl. Phys. 2001. V. 89, № 5. P. 2932–2938.
44. Walkauskas S.G. et al. Lattice thermal conductivity of wires // J. Appl. Phys. 1999. V. 85, № 5. P. 2579–2582.
45. Lü X., Shen W.Z., Chu J.H. Size effect on the thermal conductivity of nanowires // J. Appl. Phys. 2002. V. 91, № 3. P. 1542–1552.
46. Maldovan M. Micro to nano scale thermal energy conduction in semiconductor thin films // J. Appl. Phys. 2011. V. 110, № 3. P. 034308.
47. Aksamija Z., Knezevic I. Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes // Phys. Rev. B. 2010. V. 82, № 4. P. 045319.
48. Chen G. Ballistic-Diffusive Heat-Conduction Equations // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86, № 11. P. 2297–2300.
49. Tang G.H. et al. Phonon boundary scattering effect on thermal conductivity of thin films // J. Appl. Phys. 2011. V. 110, № 4. P. 046102.
50. Alvarez F.X., Jou D. Memory and nonlocal effects in heat transport: From diffusive to ballistic regimes // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90, № 8. P. 083109.

51. Mingo N., Broido D.A. Length Dependence of Carbon Nanotube Thermal Conductivity and the “Problem of Long Waves” // *Nano Lett.* 2005. V. 5, № 7. P. 1221–1225.
52. Singh D., Murthy J.Y., Fisher T.S. Spectral phonon conduction and dominant scattering pathways in graphene // *J. Appl. Phys.* 2011. V. 110, № 9. P. 094312.
53. Zhang G., Li B. Thermal conductivity of nanotubes revisited: Effects of chirality, isotope impurity, tube length, and temperature // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 123, № 11. P. 114714.
54. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
55. Wang J.-S., Wang J., Zeng N. Nonequilibrium Green’s function approach to mesoscopic thermal transport // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 74, № 3. P. 033408.
56. Wang J.-S. et al. Nonequilibrium Green’s function method for thermal transport in junctions // *Phys. Rev. E.* 2007. V. 75, № 6. P. 061128.
57. Length-Scale Dependent Phonon Interactions / ed. Shindé S.L., Srivastava G.P. New York, NY: Springer New York, 2014. V. 128.
58. Moore A.L. et al. Phonon backscattering and thermal conductivity suppression in sawtooth nanowires // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 93, № 8. P. 083112.
59. Lacroix D. et al. Monte Carlo simulation of phonon confinement in silicon nanostructures: Application to the determination of the thermal conductivity of silicon nanowires // *Appl. Phys. Lett.* 2006. V. 89, № 10. P. 103104.
60. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // *J. Phys. Condens. Matter.* 2009. V. 21, № 39. P. 395502.
61. Carrete J. et al. almaBTE : A solver of the space–time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials // *Comput. Phys. Commun.* 2017. V. 220. P. 351–362.
62. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Calculation of the effective thermal conductivity of a superlattice based on the Boltzmann transport equation using first-principle

calculations // *Izv. Vysshikh Uchebnykh Zaved. Mater. Elektronnoi Tekhniki Mater. Electron. Eng.* 2020. V. 22, № 3. P. 190–196.

63. Mazumder S., Majumdar A. Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization // *J. Heat Transf.* 2001. V. 123, № 4. P. 749–759.

64. Chen Y. et al. Monte Carlo Simulation of Silicon Nanowire Thermal Conductivity // *J. Heat Transf.* 2005. V. 127, № 10. P. 1129–1137.

65. Liu W., Asheghi M. Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers // *Appl. Phys. Lett.* 2004. V. 84, № 19. P. 3819–3821.

66. Ju Y.S., Goodson K.E. Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 74, № 20. P. 3005–3007.

67. Cuffe J. et al. Reconstructing phonon mean-free-path contributions to thermal conductivity using nanoscale membranes // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 91, № 24. P. 245423.

68. Ziman J.M. *Electrons and Phonons.* Oxford University Press, 2001.

69. Berman R., Foster E.L., Ziman J.M. Thermal conduction in artificial sapphire crystals at low temperatures I. Nearly perfect crystals // *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.* 1955. V. 231, № 1184. P. 130–144.

70. Casimir H.B.G. Note on the conduction of heat in crystals // *Physica.* 1938. V. 5, № 6. P. 495–500.

71. Mingo N. et al. Predicting the Thermal Conductivity of Si and Ge Nanowires // *Nano Lett.* 2003. V. 3, № 12. P. 1713–1716.

72. Mingo N. Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68, № 11. P. 113308.

73. Zhang Z.M. *Nano/microscale heat transfer.* New York: McGraw-Hill Professional, 2007. 479 p.

74. Дмитриев А.С. *Введение в нанотеплофизику.* Бином. Лаборатория знаний, 2015. 792 p.

75. Alvarez F.X., Jou D., Sellitto A. Phonon hydrodynamics and phonon–boundary scattering in nanosystems // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 105, № 1. P. 014317.

76. Fuchs K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals // *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* 1938. V. 34, № 1. P. 100–108.
77. Sondheimer E.H. The mean free path of electrons in metals // *Adv. Phys.* 2001. V. 50, № 6. P. 499–537.
78. Dingle R.B. The electrical conductivity of thin wires // *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.* 1950. V. 201, № 1067. P. 545–560.
79. Macdonald D.K., Sarginson K. Size effect variation of the electrical conductivity of metals // *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.* 1950. V. 203, № 1073. P. 223–240.
80. Asheghi M. et al. Phonon-boundary scattering in thin silicon layers // *Appl. Phys. Lett.* 1997. V. 71, № 13. P. 1798–1800.
81. Asheghi M. et al. Thermal conduction in doped single-crystal silicon films // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 91, № 8. P. 5079–5088.
82. Asheghi M. et al. Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates // *J. Heat Transf.* 1998. V. 120, № 1. P. 30–36.
83. Liu W., Asheghi M. Thermal Conductivity Measurements of Ultra-Thin Single Crystal Silicon Layers // *J. Heat Transf.* 2006. V. 128, № 1. P. 75–83.
84. Liu W., Asheghi M. Thermal conduction in ultrathin pure and doped single-crystal silicon layers at high temperatures // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 98, № 12. P. 123523.
85. Liu W., Asheghi M. Thermal Conductivity Measurements of Ultra-Thin Single Crystal Silicon Layers // *J. Heat Transf.* 2006. V. 128, № 1. P. 75–83.
86. Malhotra A., Maldovan M. Impact of Phonon Surface Scattering on Thermal Energy Distribution of Si and SiGe Nanowires // *Sci. Rep.* 2016. V. 6, № 1. P. 25818.
87. Malhotra A., Maldovan M. Surface scattering controlled heat conduction in semiconductor thin films // *J. Appl. Phys.* 2016. V. 120, № 20. P. 204305.
88. Maldovan M. Specular reflection leads to maximum reduction in cross-plane thermal conductivity // *J. Appl. Phys.* 2019. V. 125, № 22. P. 224301.
89. Maldovan M. Thermal conductivity of semiconductor nanowires from micro to nano length scales // *J. Appl. Phys.* 2012. V. 111, № 2. P. 024311.

90. Дмитриев А.С., Тимохов Н.В. О вычислении фононной теплопроводности диэлектрических и полупроводниковых нанопроволок в приближении времени релаксации // Вестник МЭИ. 2006. № 6. P. 125–133.
91. Prasher R.S., Phelan P.E. Size Effects on the Thermodynamic Properties of Thin Solid Films // J. Heat Transf. 1998. V. 120, № 4. P. 1078–1081.
92. Prasher R.S., Phelan P. e. Non-dimensional size effects on the thermodynamic properties of solids // Int. J. Heat Mass Transf. 1999. V. 42, № 11. P. 1991–2001.
93. Majumdar A. Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films // J. Heat Transf. 1993. V. 115, № 1. P. 7–16.
94. Joshi A.A., Majumdar A. Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films // J. Appl. Phys. 1993. V. 74, № 1. P. 31–39.
95. Chen G., Tien C.L. Thermal conductivities of quantum well structures // J. Thermophys. Heat Transf. 1993. V. 7, № 2. P. 311–318.
96. Chen G. Size and Interface Effects on Thermal Conductivity of Superlattices and Periodic Thin-Film Structures // J. Heat Transf. 1997. V. 119, № 2. P. 220–229.
97. Kuleyev I.G., Kuleyev I.I., Bakharev S.M. Phonon focusing and temperature dependences of the thermal conductivity of silicon nanowires // J. Exp. Theor. Phys. 2014. V. 118, № 2. P. 253–265.
98. Ward A., Broido D.A. Intrinsic phonon relaxation times from first-principles studies of the thermal conductivities of Si and Ge // Phys. Rev. B. 2010. V. 81, № 8. P. 085205.
99. Chung J.D., McGaughey A.J.H., Kaviani M. Role of Phonon Dispersion in Lattice Thermal Conductivity Modeling // J. Heat Transf. 2004. V. 126, № 3. P. 376–380.
100. Maznev A.A. Boundary scattering of phonons: Specularity of a randomly rough surface in the small-perturbation limit // Phys. Rev. B. 2015. V. 91, № 13. P. 134306.
101. Ogilvy J.A. Wave scattering from rough surfaces // Rep. Prog. Phys. 1987. V. 50, № 12. P. 1553–1608.

102. Holland M.G. Analysis of Lattice Thermal Conductivity // Phys. Rev. 1963. V. 132, № 6. P. 2461–2471.
103. Bjerrum Møller H. Inelastic scattering of neutrons in solids and liquids // Nucl. Phys. 1962. V. 36. P. 528.
104. Nilsson G., Nelin G. Study of the Homology between Silicon and Germanium by Thermal-Neutron Spectrometry // Phys. Rev. B. 1972. V. 6, № 10. P. 3777–3786.
105. Lacroix D. et al. Phonon transport in silicon, influence of the dispersion properties choice on the description of the anharmonic resistive mechanisms // Eur. Phys. J. B. 2009. V. 67, № 1. P. 15–25.
106. Mittal A., Mazumder S. MonteCarlo Study of Phonon Heat Conduction in Silicon Thin Films Including Contributions of OpticalPhonons // J. Heat Transf. 2010. V. 132, № 5. P. 052402.
107. Narumanchi S.V.J., Murthy J.Y., Amon C.H. Submicron Heat Transport Model in Silicon Accounting for Phonon Dispersion and Polarization // J. Heat Transf. 2004. V. 126, № 6. P. 946–955.
108. Tian Z. et al. On the importance of optical phonons to thermal conductivity in nanostructures // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99, № 5. P. 053122.
109. Glassbrenner C.J., Slack G.A. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point // Phys. Rev. 1964. V. 134, № 4A. P. A1058–A1069.
110. Morelli D.T., Heremans J.P., Slack G.A. Estimation of the isotope effect on the lattice thermal conductivity of group IV and group III-V semiconductors // Phys. Rev. B. 2002. V. 66, № 19. P. 195304.
111. Klemens P.G. The Scattering of Low-Frequency Lattice Waves by Static Imperfections // Proc. Phys. Soc. Sect. A. 1955. V. 68, № 12. P. 1113–1128.
112. Tamura S. Isotope scattering of dispersive phonons in Ge // Phys. Rev. B. 1983. V. 27, № 2. P. 858–866.
113. Dames C., Chen G. Theoretical phonon thermal conductivity of Si/Ge superlattice nanowires // J. Appl. Phys. 2004. V. 95, № 2. P. 682–693.

114. Bass F.G., Fuks I.M. Wave scattering from statistically rough surfaces. Oxford ; New York: Pergamon Press, 1979. 527 p.