

УДК 536.2.022

Теплоперенос у упорядоченных многослойных наноструктурах

Д.А. Воробьев

Аспирант, кафедра «Теплофизика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

*Научный руководитель: Хвесюк В.И., д.т.н., профессор кафедры «Теплофизика»
МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

МГТУ им. Н.Э. Баумана

den_vorobyow@mail.ru

1. Введение

Многослойные наноструктуры широко распространены в современной микроэлектронике. Рост производительности приборов, основанных на микроэлектронике, ведет к повышению потребляемой ими мощности, а, следовательно, к необходимости отвода выделяющегося в процессе работы тепла и расчета теплопереноса в многослойных структурах.

Многослойные бинарные структуры – плоские образования с толщиной одного слоя 10-50 нм. Количество слоев в структуре лежит в пределах от сотен до тысяч. Слои выполнены из двух различных материалов (в рассматриваемой статье Al и Ti) и чередуются друг с другом так, что у каждого слоя оба соседних выполнены из другого материала.

Толщина слоя в таких системах обычно значительно меньше длины свободного пробега переносчиков тепла (электронов и фононов). В таком случае закон Фурье не применим для описания распространения тепла в одном слое. Использование уравнения теплопроводности Фурье-Кирхгофа исключается.

Для описания процесса теплопереноса в слоистых структурах предлагается следующая модель. Внутри каждого слоя температура одинакова по всей его ширине. На границах слоев имеют место конечные скачки температуры, впервые экспериментально обнаруженные П.Л. Капицей в 1941 году на границе жидкого гелия и

<http://sntbul.bmstu.ru/doc/555109.html>

материала сосуда, в котором находился гелий. Таким образом, в многослойных наноструктурах картина распределения температуры значительно отличается от таковой для массивных сплошных тел.

Перенос тепла в слоистых наноструктурах определяется не процессами рассеяния электронов и фононов внутри решетки, а процессами рассеяния частиц на интерфейсах (границах слоев). Иными словами, процесс теплопереноса определяется тепловым сопротивлением ρ_k (тепловой проводимостью σ_k) Капицы. Вместо закона Фурье следует использовать формулу, связывающую удельный тепловой поток q с разностью температур соседних слоев $(T_1 - T_2)$, впервые предложенную И.М. Халатниковым [1]:

$$q = \sigma_k \cdot (T_1 - T_2). \quad (1)$$

Процесс переноса тепла считается одномерным, то есть распространение тепла рассматривается только в направлении перпендикулярном поверхности слоев.

2. Расчет теплопереноса в слоистой структуре

Рассматривается одномерный процесс распространения тепла в многослойной наноструктуре, состоящей из 1000 чередующихся слоев материалов Al и Ti толщиной 50 нм каждый. В начальный момент времени первые 10 слоев имеют температуру 900 К, а все последующие слои - 300 К (имитация импульсного нагрева, [2]). На рис. 1 показана рассматриваемая многослойная структура.

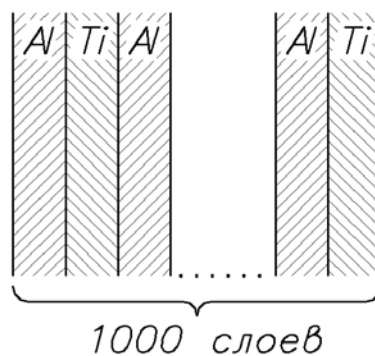


Рис. 1. Упорядоченная многослойная наноструктура

Для расчета переноса тепла в структуре используется уравнение:

$$C_i \cdot h_i \cdot \frac{dT_i}{dt} = \sigma_{k_i} \cdot (T_{i-1} - T_i) - \sigma_{k_{i+1}} \cdot (T_i - T_{i+1}), \quad (2)$$

где i – номер слоя в многослойной структуре;

C – теплоемкость материала, Дж/м³К;

h – толщина слоя, м;

Левая часть уравнения (2) есть изменение энергии i -го слоя в единицу времени, а правая – подведенная и отведенная мощности, соответственно. В конечно-разностной форме уравнение (2) имеет вид:

$$C_i \cdot h_i \cdot \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = \sigma_{k_i} \cdot (T_{i-1}^n - T_i^n) - \sigma_{k_{i+1}} \cdot (T_i^n - T_{i+1}^n), \quad (3)$$

где n – номер временного слоя.

Рис. 2 поясняет расчетную схему, описываемую уравнением (3).

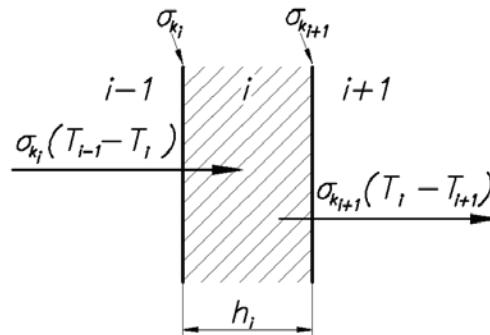


Рис. 2. Энергетический баланс i -го слоя

В расчете принято, что температура внутри отдельно взятого слоя неизменна по его толщине. Изменение температуры происходит скачкообразно на границах слоев. Крайние слои структуры теплоизолированы от внешней среды. На рис. 3 представлен график распределения температуры по слоям наноструктуры в момент времени $t = 10^{-6}$ с.

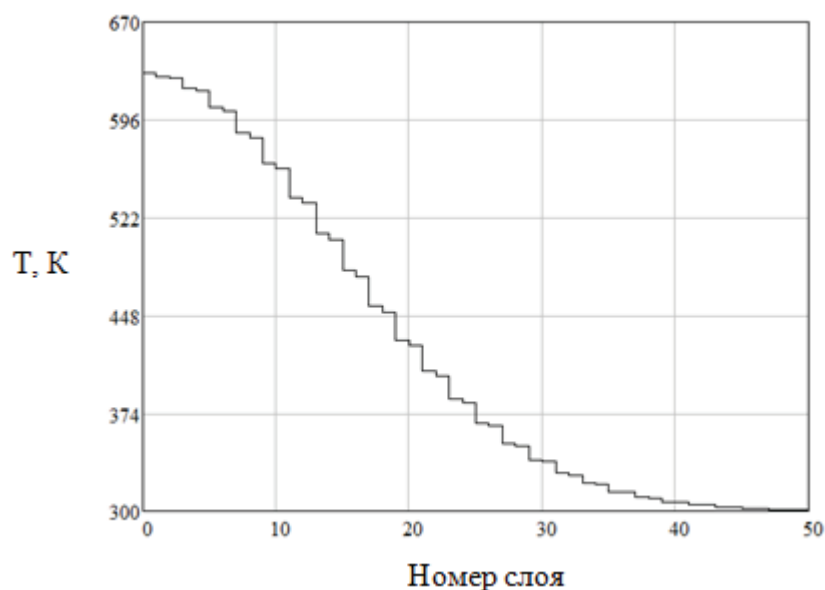


Рис. 3. Распределение температуры по слоям наноструктуры: момент времени $t = 10^{-6}$ с

Из графика видно, что в средней его части имеются «малые» и «большие» скачки температуры на границах слоев. Данный факт объясняется различной величиной проводимости Капицы при переходе от слоя Al к слою Ti и от слоя Ti к слою Al. Показанный график получен при условии, что проводимость Капицы при переходе Al–Ti в 5 раз меньше, чем при переходе Al–Ti.

В ходе анализа (3) выявлена зависимость расчетной схемы от шага по времени τ . На рис. 4 показаны распределения температур при шаге по времени равном 10^{-9} и 10^{-13} с. При шаге по времени большем 10^{-9} с расчетная схема решения не имеет.

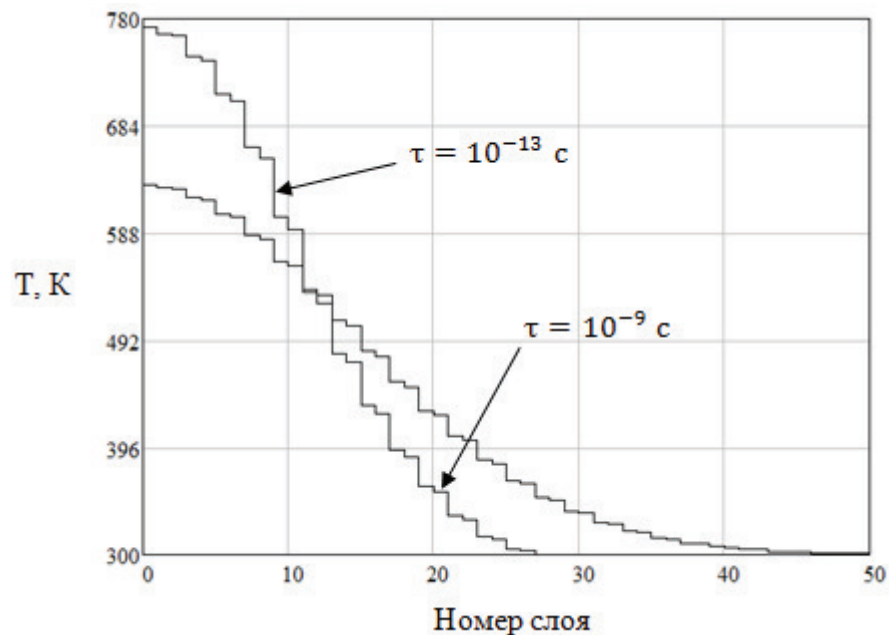


Рис. 4. Распределение температуры по слоям наноструктуры: момент времени $t = 10^{-6}$ с при различных шагах расчетной схемы по времени

Как видно из графиков, при уменьшении шага по времени распределение температуры становится более крутым, то есть перенос теплоты внутри структуры должен замедлиться. Полученный результат может быть объяснен, если принять в рассмотрение, что скорость переноса тепла в отдельно взятом слое ограничена скоростью звука $a_{зв}$ для данного материала. При уменьшении шага по времени наступает момент, когда он становится меньше характерного времени распространения теплоты в слое. Следовательно, рассматриваемая схема имеет ограничение по минимально возможному шагу по времени. Таким образом, имеется следующее условие:

$$\tau \geq \frac{h}{a_{зв}}. \quad (4)$$

Поскольку скорость звука в титане 4140 м/с, в алюминии – 5100 м/с, то в (4) следует поставлять значение скорости для титана. Для слоя титана толщиной 50 нм шаг по времени должен быть не менее $1,21 \cdot 10^{-11}$ с. При тщательном анализе решений, полученных по уравнению (3), выявлено, что при шаге по времени $\approx 10^{-11}$ с и менее наблюдается смещение температурной кривой аналогичное показанному на рис. 4.

Из теории теплопроводности известно, что коэффициент температуропроводности a связан со скоростью переноса тепла выражением:

$$w \sim \sqrt{\frac{a}{\tau_p}}, \quad (5)$$

где

$$a = \frac{\lambda}{C_p \cdot \rho}. \quad (6)$$

Согласно (6) для алюминия коэффициент температуропроводности имеет величину $9,16 \cdot 10^{-5}$ м²/с. Время релаксации для алюминия $\tau_p \sim 10^{-11}$ с, тогда по выражению (5) скорость распространения тепла в алюминии $w \sim 3000$ м/с, что 1,7 раз меньше скорости звука в алюминии. Таким образом, в выражении (5) под w следует понимать $a_{зв}$.

Предположение об ограничении минимального шага по времени временем распространения тепла может быть подтверждено, если рассмотреть структуру аналогичную Al – Ti, материалы которой обладают теми же свойствами, но теплоемкости материалов принять в 10^4 раз большими. Тогда, при прочих равных условиях, скорость распространения тепла (скорость звука) должна уменьшиться в 10^2 раз, а время распространения тепла, соответственно, увеличиться во столько же раз: $\tau \sim 10^{-9}$ с. Расчеты по выражению (3) для такой структуры показывают, что отклонение температурного профиля начинается при шаге по времени $\approx 10^{-9}$ с.

3. Сравнение теплопереноса в слоистой структуре и сплошном теле

Ввиду особенностей теплопереноса в многослойных наноструктурах вопрос сравнения теплопереноса в таких структурах с теплопереносом в сплошных телах является весьма сложным. В литературных источниках, например [3], встречается сравнение коэффициентов теплопроводности сплошного тела и слоистой структуры.

В данной статье произведено сравнение слоистой наноструктуры и эквивалентного сплошного тела (слоя) толщиной:

$$\delta = \sum_{i=1}^{1000} h_i.$$

Полное тепловое сопротивление слоистой структуры определяется суммой:

$$\rho_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{1000} \left(\rho_{k_i} + \frac{h_i}{\lambda_i} \right), \quad (7)$$

а тепловое сопротивление эквивалентного сплошного тела:

$$\rho_{\text{bulk}} = \frac{\delta}{\lambda_{\text{bulk}}}. \quad (8)$$

Из выражений (7), (8) может быть найден коэффициент теплопроводности материала эквивалентного сплошного тела:

$$\lambda_{\text{bulk}} = \frac{\delta}{\rho_{\text{bulk}}}. \quad (9)$$

На рис. 5 показаны графики распределения температуры в слоистой структуре Al-Ti и сплошном теле с коэффициентом температуропроводности $a = 2,4 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ в моменты времени $t = 10^{-7}, 5 \cdot 10^{-7}, 10^{-6} \text{ с}$.

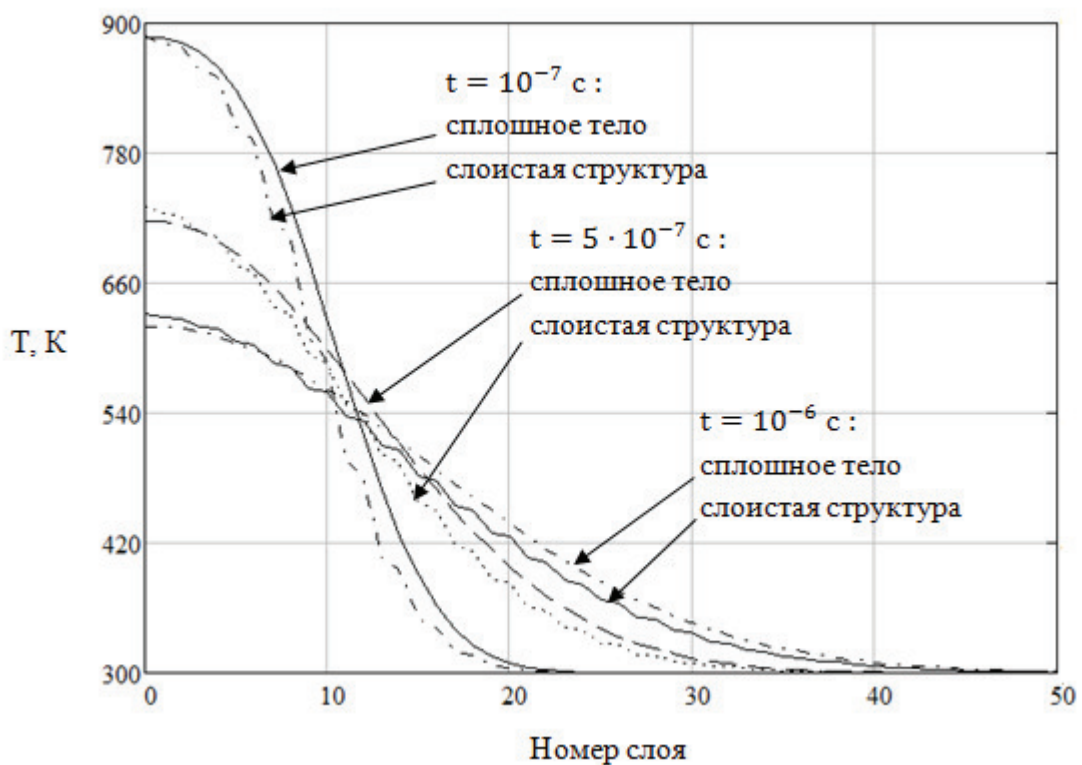


Рис. 5. Сравнение теплопереноса в слоистой структуре и сплошном теле

Как видно распределения температуры в слоистой структуре и сплошном теле достаточно хорошо накладываются друг на друга. Однако полученное значение коэффициента температуропроводности эквивалентного сплошного тела на 3 порядка меньше, чем у алюминия. Данный результат указывает на значительно более высокое тепловое сопротивление слоистой структуры по сравнению со сплошным телом.

Заключение

На основании уравнения баланса энергии для одного слоя проведены расчеты теплопереноса в упорядоченной многослойной наноструктуре Al–Ti. Получено распределение температуры в структуре. Выявлена зависимость расчетной схемы от шага по времени. Показано, что минимальный шаг по времени определяется скоростью распространения тепла в слое.

Предложен критерий сравнения слоистых структур и сплошных тел. Произведено сравнение теплопереноса в многослойной структуре и сплошном теле.

Список литературы

1. Халатников И.М. Введение в теорию сверхтекучести. М.: Наука, 1965. 160 с.
2. Температуропроводность нанокompозитных многослойных пленок TiAl / П.А. Цыганков [и др.] Материалы XXII Международного симпозиума "Тонкие пленки в электронике", М.: Техномаш, 2009, с.469
3. V. Samvedi, V. Tomar. The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si–Ge multilayered structures, 2009 Nanotechnology 20 365701. URL. <http://iopscience.iop.org/0957-4484/20/36/365701> (дата обращения: 01.02.2013).