

Метод расчета нестационарного нагрева наноструктур

09, сентябрь 2013

DOI: 10.7463/0913.0617255

Воробьев Д. А., Хвесюк В. И.

УДК 536.2.022

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

den_vorobyow@mail.ru

khves@power.bmstu.ru

Введение

Проблема расчета теплопереноса в многослойных наноструктурах связана с развитием ряда направлений нанотехнологий, где эти структуры нашли применение, в частности, микроэлектроники, основанной на структурированных полупроводниковых микроструктурах.

Одним из видов многослойных упорядоченных структур являются 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 AlAs и GaAs 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 теплоты (электронов и фононов). В таком случае закон Фурье не применим для описания распространения теплоты 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 материала сосуда, в котором находился гелий. Таким образом, в

многослойных наноструктурах картина распределения температуры значительно отличается от таковой для массивных сплошных тел.

Перенос теплоты 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 (обратная величина – тепловая проводимость 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 для случая контакта жидкого гелия с твердым телом [1]:

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

Позднее было доказано, что сопротивление Капицы имеет место между любыми парами различных материалов [5].

Процесс теплопереноса считается одномерным, то есть распространение теплоты рассматривается только в направлении перпендикулярном поверхности слоев.

Модель теплопереноса в слоистой структуре

Рассматривается одномерный нестационарный процесс распространения тепла в теплоизолированной упорядоченной многослойной наноструктуре, состоящей из 1000 чередующихся слоев материалов AlAs и GaAs. В таблице 1 для справки приведены теплофизические характеристики рассматриваемых материалов (теплоемкость C , плотность ρ , скорость звука v_s , средняя величина сопротивления Капицы при контакте материалов ρ_k).

Таблица 1. Теплофизические характеристики материалов [4].

Теплофизическая характеристика	Материал	
	AlAs	GaAs
C , Дж/кг·К	424	327
ρ , кг/м ³	3730	5320
v_s , м/с	6258	5242
ρ_k , м ² ·К/Вт	$0,625 \cdot 10^{-9}$	

В начальный момент времени первые 50 слоев имеют температуру 900 К, а все последующие слои – 300 К (имитация импульсного нагрева, [2]). На рисунке 1 представлен тепловой баланс отдельно взятого i -го слоя.

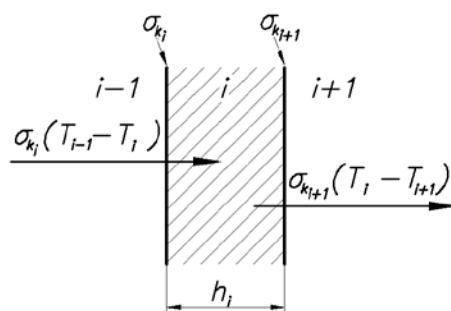


Рис. 1. Тепловой баланс i -го слоя.

В соответствии с рисунком 1 для расчета переноса теплоты в наноструктуре используется следующее соотношение:

$$C_i \cdot h_i \cdot \Delta T_i = [\sigma_{k_i} \cdot (T_{i-1} - T_i) - \sigma_{k_{i+1}} \cdot (T_i - T_{i+1})] \cdot \tau, \quad (2)$$

где i – номер слоя в многослойной структуре;

ΔT , К – изменение температуры слоя за время τ ;

h , м – толщина слоя.

Левая часть уравнения (2) есть изменение энергии i -го слоя, а правая – подведенная и отведенная теплоты за время τ , соответственно. Данное соотношение позволяет найти распределение температур в наноструктурах при известных значениях сопротивления Капицы, тогда как формула Халатникова используется для определения сопротивления Капицы.

Условие теплоизоляции внешних границ наноструктуры получено обнулением проводимостей на этих границах.

В расчетах использована неявная конечно-разностная схема, позволяющая избежать ограничений на временной шаг имеющих место при использовании явной схемы расчета. Необходимо отметить, что в случае явной схемы расчета максимальный временной шаг имеет физическое ограничение, связанное со скоростью распространения тепловой волны в материалах многослойной наноструктуры. Максимальное значение шага может быть определено как:

$$\tau_{\max} = \frac{h}{v_s}. \quad (3)$$

В случае одинаковых толщин слоев скорость звука берется для материала с меньшим ее значением.

Численное исследование процесса теплопереноса

Согласно (2) теплоперенос в многослойных структурах зависит от свойств материалов слоев (теплоемкости C), их толщин h и проводимости интерфейсов σ_k между слоями. В последнем случае важно отметить, что сопротивление интерфейсов ρ_k не одинаково при переходе от слоя из материала AlAs к слою из материала GaAs и от GaAs к AlAs. На рисунке 2 видны «малые» и «большие» скачки температуры на границах слоев, обусловленные различной величиной сопротивлений интерфейсов.

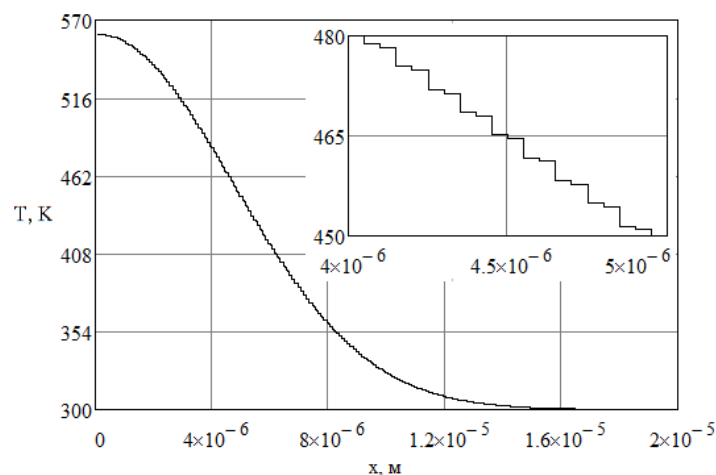


Рис. 2. Характерное распределение температуры по слоям наноструктуры при

$$h_{\text{AlAs}}=h_{\text{GaAs}}=50 \text{ нм}, t=10^{-7} \text{ с.}$$

В дальнейших расчетах для удобства используется отношение проводимостей:

$$k = \frac{\sigma_{k\text{AlAs}}}{\sigma_{k\text{GaAs}}}. \quad (4)$$

где $\sigma_{k\text{AlAs}}$ – проводимость интерфейса при переходе от AlAs к GaAs;

$\sigma_{k\text{GaAs}}$ – проводимость интерфейса при переходе от GaAs к AlAs;

На рисунке 3 показаны профили температур, полученные при различных временах расчета.

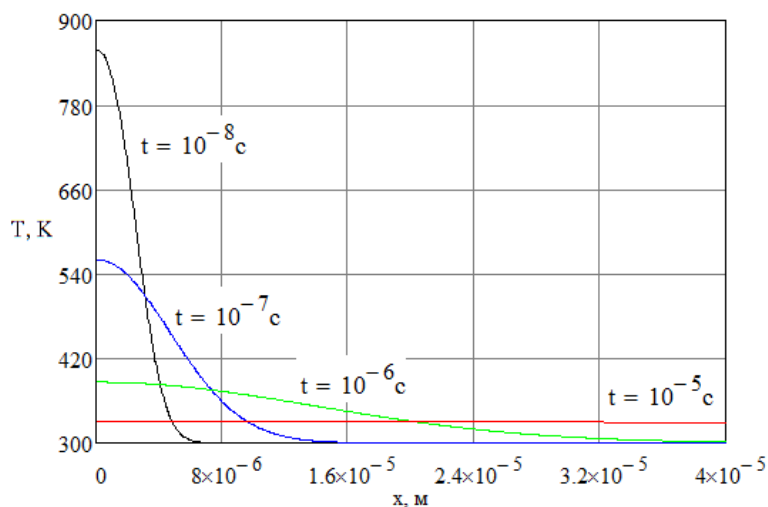


Рис. 3. Распределение температуры в многослойной структуре при различных временах расчета t , с ($h_{\text{AlAs}}=h_{\text{GaAs}}=50$ нм).

На рисунке 4 представлены распределения температур при различной толщине слоев для случая одинаковых толщин слоев AlAs и GaAs, т.е. $h_{\text{AlAs}}=h_{\text{GaAs}}$. Из графиков видно, что с увеличением толщины слоя процесс теплопереноса замедляется. Хотя ранее было сказано, что в многослойных наноструктурах толщины слоев имеют величину 10 – 50 нм, расчет был также произведен при больших толщинах слоя.

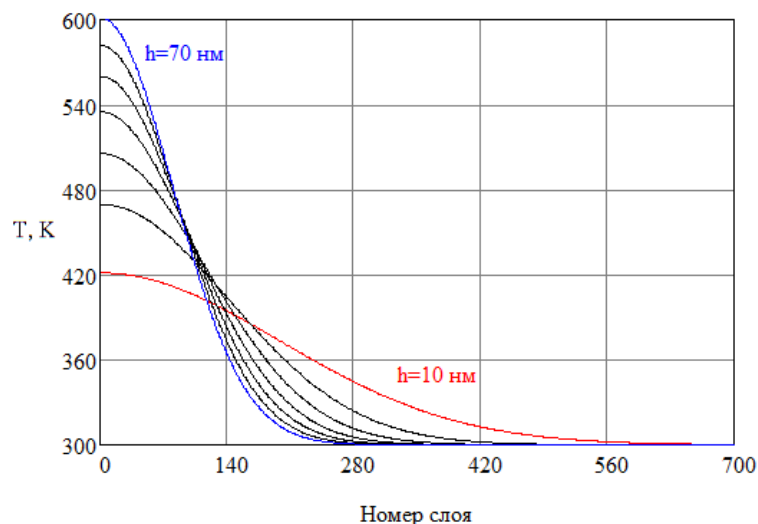


Рис. 4. Распределение температуры в многослойной структуре при толщинах слоев от 10 до 70 нм с шагом 10 нм. На рисунке цветом выделены распределения температуры при крайних значениях толщины слоя. $t=10^{-7}$ с.

Исследование теплопереноса при различных толщинах слоев AlAs и GaAs ($h_{\text{AlAs}} \neq h_{\text{GaAs}}$) показало, что в случае $h_{\text{AlAs}}=20$ нм и $h_{\text{GaAs}}=40$ нм, а также в аналогичных случаях, полученное распределение температуры с высокой точностью совпадает с распределением для $h_{\text{AlAs}}=h_{\text{GaAs}}=(20+40)/2=30$ нм.

В расчетах также было получено, что соотношение между скоростями теплопереноса сохраняется во времени при различной толщине слоя.

Все выше описанные расчеты были произведены при значении отношения проводимостей $k=5$. Расчеты, проведенные для значений k в диапазоне от 0,1 до 10, показали незначительное различие температурных профилей при различных значениях k . Данный факт объясняется неизменностью суммарного термического сопротивления интерфейсов структуры, т.е.:

$$\rho_k = \frac{1}{\sigma_{k\text{AlAs}}} + \frac{1}{\sigma_{k\text{GaAs}}} = \text{const.} \quad (5)$$

Несмотря на то, что для пары AlAs/GaAs термическое сопротивление Капицы является известной величиной, в целях исследования влияния последнего на процесс теплопереноса были произведены расчеты при различных величинах сопротивления ρ_k , результаты которых показаны на рисунке 5.

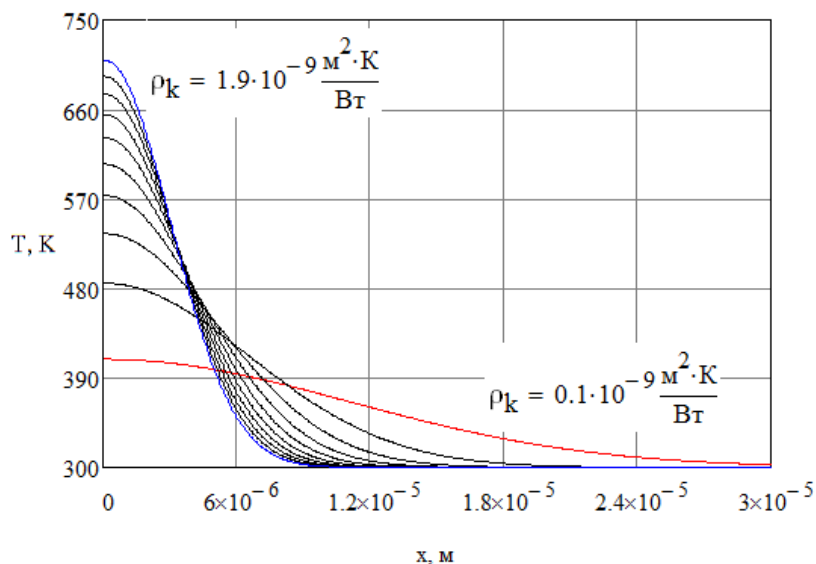


Рис. 5. Распределение температуры в многослойной структуре при изменении термического сопротивления интерфейсов от $0,1 \cdot 10^{-9}$ до $1,9 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2\text{К/Вт}$ с шагом $0,2 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2\text{К/Вт}$. На рисунке цветом выделены распределения температуры при крайних значениях термического сопротивления. $t=10^{-7} \text{ с}$, $k=2$.

Расчеты, проведенные при $k=5$ и $k=8$, выявили, что тенденция, показанная на рис. 5 имеет место и в этих случаях.

Проведенные расчеты основаны на идеализированном случае, когда не наблюдается отклонений проводимостей интерфейсов, т.е. все переходы от AlAs к GaAs имеют одинаковую проводимость σ_{kAlAs} , и все переходы от GaAs к AlAs имеют одинаковую проводимость σ_{kGaAs} . На рисунке 6 показано распределение температуры при наличии отклонения проводимости произвольно взятого интерфейса.

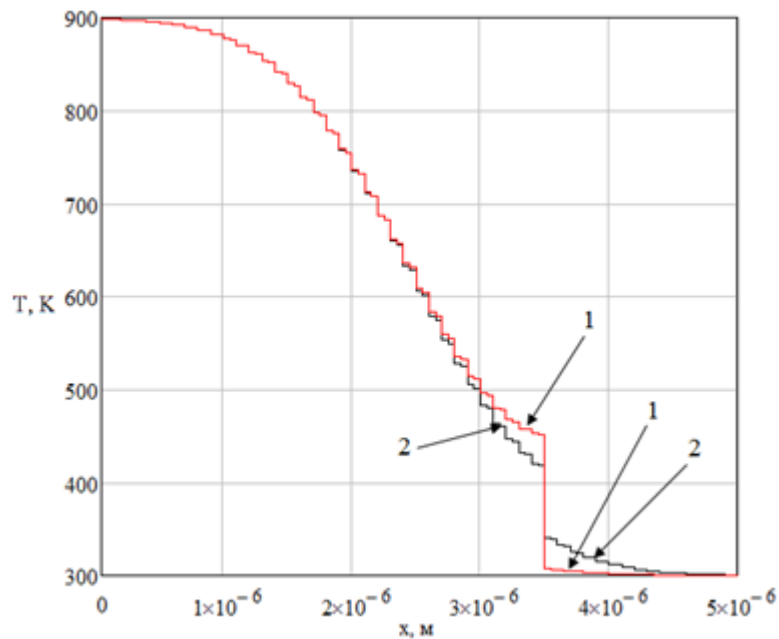


Рис. 6. Распределения температуры при отклонении проводимости интерфейса:

- 1 – проводимость в 100 раз меньше номинальной;
- 2 - проводимость в 10 раз меньше номинальной.

На графиках рис. 6 виден значительный скачок температуры на интерфейсе с низкой проводимостью. Величина скачка закономерно увеличивается при уменьшении проводимости (увеличении сопротивления) интерфейса, причем эта зависимость носит нелинейный характер.

Выводы

В работе рассмотрен нестационарный процесс теплопереноса в теплоизолированной многослойной упорядоченной наноструктуре AlAs/GaAs с заданным начальным распределением температуры. Показаны распределения температуры в различные моменты времени. Установлено замедление процесса теплопереноса при увеличении толщины слоя. Аналогичная тенденция выявлена при увеличении отношения проводимостей Капицы и сопротивления интерфейсов.

Список литературы

1. Халатников И.М. Введение в теорию сверхтекучести. М.: Наука, 1965. С. 128-136.
2. Попович А.Ф., Ральченко В.Г., Власов А.В., Цыганков П.А.
Температуропроводность нанокompозитных многослойных пленок Ti-Al // Тонкие пленки в электронике: материалы XXII Междунар. симп. (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 9-11 сентября 2009 г.). М.: ЦНИТИ «Техномаш», 2009. С. 469-473.
3. Samvedi V., Tomar V. The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si–Ge multilayered structures // Nanotechnology. 2009. Vol. 20, no. 36. Art. no. 365701. DOI: [10.1088/0957-4484/20/36/365701](https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/36/365701)
4. Sadao Adashi. Properties of Semiconductors Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors. John Wiley & Sons, 2009. 400 p. DOI: 10.1002/9780470744383
5. Cahill D.G., Ford W.K., Goodson K.E., Mahan G.D., Majumdar A., Maris H.J., Merlin R., Phillpot S.R. Nanoscale thermal transport // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 93, no. 2. P. 793 (26 pages). <http://dx.doi.org/10.1063/1.1524305>

Calculation method for non-stationary heating of nano-structures

09, September 2013

DOI: 10.7463/0913.0617255

Vorob'ev D.A., Hvesyuk V.I.

Bauman Moscow State Technical University, 105005, Moscow, Russian Federation

den_vorobyow@mail.rukhves@power.bmstu.ru

A non-stationary process of heat transfer in an insulated ordered multilayer nanostructure with specified initial temperature distribution was considered in the article. The structure consists of 1000 alternating layers of AlAs and GaAs. A heat transfer process model based on heat balance of a single layer was described in this paper. This model was used for heat transfer computations in ordered binary multilayer nanostructures for the first time. A process of heat transfer was investigated at different time moments, with different thicknesses of layers and heat resistances of interfaces. A case of deviation of periodicity in the structure was considered.

Publications with keywords: [nanostructure](#), [heat transfer](#), [Kapitza resistance](#), [Kapitza conductivity](#), [binary structure](#)

Publications with words: [nanostructure](#), [heat transfer](#), [Kapitza resistance](#), [Kapitza conductivity](#), [binary structure](#)

References

1. Khalatnikov I.M. *Vvedenie v teoriyu sverkhtekuchesti* [Introduction to the theory of superfluidity]. Moscow, Nauka, 1965. S. 128-136.
2. Popovich A.F., Ral'chenko V.G., Vlasov A.V., Tsygankov P.A. *Temperaturoprovodnost' nanokompozitnykh mnogosloynnykh plenok Ti-Al* [Thermal diffusivity of nanocomposite multilayer films Ti-Al]. *Tonkie plenki v elektronike: materialy 22 Mezhdunar. simp.* [Thin Films in Electronics: proc. of the 22nd Intern. Symp.], Moscow, Bauman MSTU, 9-11 September 2009. Moscow, TsNITI "Tekhnomash" Publ., 2009, pp. 469-473.
3. Samvedi V., Tomar V. The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si-Ge multilayered structures. *Nanotechnology*, 2009, vol. 20, no. 36, art. no. 365701. DOI: [10.1088/0957-4484/20/36/365701](https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/36/365701)
4. Sadao Adashi. *Properties of Semiconductors Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. John Wiley & Sons, 2009. 400 p. DOI: 10.1002/9780470744383
5. Cahill D.G., Ford W.K., Goodson K.E., Mahan G.D., Majumdar A., Maris H.J., Merlin R., Phillpot S.R. Nanoscale thermal transport. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 93, no. 2, p. 793 (26 pages). <http://dx.doi.org/10.1063/1.1524305>