

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 35 страниц, 1 рисунок.
Список использованных источников содержит 9 позиций.

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

Выпускная квалификационная работа посвящена вопросу разработки модели теплопереноса в многослойных структурах.

Оглавление

| | |
|------------------------------------------------------------------|----|
| Оглавление..... | 2 |
| ВВЕДЕНИЕ..... | 3 |
| ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ..... | 5 |
| 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ..... | 6 |
| 1.1. ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЗАДАЧИ..... | 7 |
| 1.2. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СТРУКТУРЫ..... | 11 |
| 1.3. АРСЕНИД ГАЛЛИЕВЫЕ СТРУКТУРЫ..... | 18 |
| 1.4. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР..... | 19 |
| 1.5. АСПЕКТЫ ЗАДАЧИ С ПОЗИЦИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ..... | 20 |
| 2. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ..... | 22 |
| 2.1. МОДЕЛЬ..... | 23 |
| 2.2. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ..... | 29 |
| 2.3. АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ МОДЕЛИ..... | 29 |
| ВЫВОДЫ..... | 32 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ..... | 34 |
| Список источников..... | 35 |

ВВЕДЕНИЕ

Как подчеркивалось в [4] «возникшая в середине прошлого столетия полупроводниковая электроника стала самым крупным достижением второй половины XX века».

Очередным этапом развития технологий можно считать микроэлектронику, явившуюся определенной степенью трансформации полупроводниковой электроники.

В современном мире с трудом можно обозначить отрасли производства и хозяйства, не затронутые интеграцией с микроэлектроникой: микропроцессоры, интегральные схемы, запоминающие устройства, все это сопровождает практически любой процесс производства, ведения хозяйства или входит в готовый продукт.

Тем не менее, в процессе интеграции микроэлектроники с другими отраслями в качестве преграды появляются такие факторы, как например: технологический, физический, энергетический.

Эти же проблемы не миновали одно из направлений развития микроэлектроники – наноэлектронику, появившуюся, как следствие процесса уменьшения топологических норм транзисторных структур, при котором был осуществлен переход от микрометрового диапазона в нанометровый линейных размеров или же сразу создавались низкоразмерные структуры.

Материалы наноэлектроники выделяются особенностями протекания физических явлений и процессов, при котором мы можем не наблюдать обычных явлений дрейфа и диффузии, а в качестве основных драйверов физических процессов следует рассматривать полевые связи, сформированные потенциальные барьеры [1].

Основными материалами для изделий наноэлектроники являются гетероструктуры, кластеры, наноструктурированные материалы, органические материалы. В работе рассматриваются гетероструктуры и наногетероструктуры, составляющие остов полупроводниковых изделий.

Для изделий, основанных на полупроводниковых материалах, температурная составляющая (процесс переноса тепла и температурные эффекты) является одним из важнейших факторов при проектировании приборов. Наноструктуры отличаются особенностью переноса тепла, о чем будет рассмотрено (сказано) далее, а гетероструктуры и наногетероструктуры представляют специфические объекты для изучения явлений теплопереноса.

В связи с этим, разработка модели теплопереноса в указанных структурах, которые можно считать многослойными представляется необходимой (актуальной) задачей.

Целью работы является разработка модели теплопереноса в многослойных структурах.

Для выполнения заявленной цели были поставлены следующие задачи:

1. Произвести обзор современных тенденций по моделям теплопереноса в многослойных структурах.
2. Разработать физико-математическую оптимизационную модель теплопереноса в многослойных полупроводниковых наноструктурах;
3. Применить разработанную оптимизационную модель к изучению процесса теплопереноса в арсенид галлиевых структурах типа AlAs/GaAs;
4. Сравнить результаты моделирования с данными, полученными из экспериментов и с помощью пакетных приложений.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная задача работы (разработка физико-математической оптимизационной модели) включает в себя несколько важных аспектов смежных наук - физики и математики, в связи с этим в теоретическом разделе работы будут представлены основные понятия классической теплофизики, особенности теплофизики для наномира, тенденции в математическом моделировании.

1.1. ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЗАДАЧИ

В современном мире при наступательном развитии микро- и наноэлектроники возникает необходимость оказывать влияние на процессы генерации, хранения, преобразования и передачи энергии, что в свою очередь, в следствии тесной взаимосвязи энергии и тепла, ставит аналогичные задачи, применительно к процессам теплопередачи.

С позиций классической физики, процесс передачи тепла, базируется на трех видах теплопередачи, позволяющих, выравнять температуру в веществе:

- теплопроводность;
- конвекция;
- излучение.

Из перечисленных видов процесса передачи тепла в данной работе рассматривается теплопроводность, при которой, как указывалось в [2] «перенос тепла строится на передаче энергии от частиц с большей энергией частицам с меньшей энергией при непосредственном контакте горячих частей системы с холодными».

Рассматривая процесс переноса тепла, определим следующих носителей энергии и импульса, занимающих основное место применительно к классической теплофизике – атомы и молекулы, электроны и ионы, коллективные степени свободы, в том числе коллективные колебания кристаллической решетки (фононы) и многие другие.

Перечисленные носители энергии являются обладателями различных степеней свободы. Носители энергии кроме прочего имеют классическую природу или волновую и их состояние в таком случае можно охарактеризовать, прибегнув к помощи набора классических величин (координата и импульс) или задать волновой функцией и квантовыми числами.

Применительно к описанному классическому случаю динамика носителей в первом примере описывается ньютоновской механикой, во втором квантовой механикой и тогда первый случай определяется уравнением Ньютона, второй же определяется уравнением Шредингера.

Согласно понятиям классической физики в качестве термодинамической системы рассматривают замкнутую систему, не имеющую взаимодействий с другими системами. В качестве макроскопической системы будем понимать только макроскопическую систему, для которой выполняются законы и соотношения термодинамики.

При установлении термодинамического равновесия в макросистемах применительно к классической теплофизике масштабы, характерные для данного явления (в пространстве и во времени) существенно превышают внутренние пространственно-временные масштабы релаксации носителей, пребывающих в состоянии термодинамического равновесия (их длины свободного пробега и времени релаксации).

В случае, когда масштабы могут считаться сравнимыми или внутренние масштабы больше размеров и характерного выхода системы в термодинамическое равновесие, следует осуществить пересмотр многих понятий, являющихся фундаментальными для классической теплофизики.

К таким случаям относится перенос тепла в наноструктурах, включая все модификации наноструктур. Применительно к процессам переноса тепла основополагающими факторами, оказывающими влияние на поведение и тепловые свойства наноструктур, служат размерные эффекты, которые можно условно разделить на классические и квантовые.

Как подчеркивалось в [2] «энергия носителей имеет корпускулярно-волновую природу».

Применительно к полупроводниковым наноструктурам на первый план в качестве носителей выступают фононы – коллективные колебания решетки.

Рассматривая длины волн фононов, можно понять, что они меняются в довольно широких пределах и имеют величины от размеров образца, до величин, равных удвоенному межатомному расстоянию.

Имея широкий предел изменения волн можно прийти к заключению, что фононы не всех длин волн обеспечивают одинаковое участие в переносе энергии в физическом теле, принимая во внимание, что в зависимости от температуры тепловая энергия фононов претерпевает изменения в соответствии с соотношением $\lambda_T = 4\pi h\nu / (k_B T)$.

Это и служит причиной того, что при разных температурах, в качестве доминирующих выступают фононы разных длин волн.

Отличительной особенностью наноструктур, помимо указанного влияния малых пространственных масштабов, являются быстрые временные процессы, играющие также немаловажную роль.

Рассмотрим подробнее эти особенности.

Применительно к малым масштабам, коими являются наноструктуры, размер поверхности существенно влияет на теплофизические свойства тела.

В положении, при котором возникает увеличение относительной доли поверхности к объему, вклад поверхностных атомов и молекул в такие теплофизические свойства системы как теплоемкость, теплопроводность существенно возрастает.

Существует ряд ограничений, связанный с размерными эффектами, оказывающий негативное влияние на применение позиций классической термодинамики к наноструктурам.

Необходимо рассмотреть основные термодинамические понятия с позиций пространственно-временных масштабов.

Помимо влияния размерных эффектов при рассмотрении позиций теплопроводности в наноструктурах крайне важным является вопрос понятия температуры, которая обычно относится к средней (тепловой) энергии частиц.

При выполнении условия полного термодинамического равновесия понятие температуры является справедливым для любых масштабов, в том числе и для структур с наноразмерами. Тем не менее, при нарушении равновесия требуется определить понятие локальной температуры, которая вводится для определенных масштабов. В таком случае определение зависит от масштабов усреднения. К примеру, толщина слоев для некоторых типов полупроводниковых сверхрешеток определена размером 2-5 нм.

Важнейшей величиной, определяющей усреднение и нахождение температуры, является характерная величина.

Можно определить некоторую среднюю величину свободного пробега $\Lambda_{ph}(\vec{k})$

для фононов, являющихся основными переносчиками тепла в наноструктурах, которая в значительной степени больше, чем размер ячейки в методе молекулярной динамики и носит название казимировского предела.

Откуда следует заключение о невозможности найти температуру как для отдельного атома, так и для плоскости атомов.

Изменение температуры на масштабах меньших $\Lambda_{ph}(\vec{k})$ также представляется невозможным.

Нельзя определить распределение $T = T(z)$ в слое, если толщина слоя меньше $\Lambda_{ph}(\vec{k})$.

Среди важнейших термодинамических параметров наногетероструктур можно отметить внутреннюю энергию и удельную теплоемкость.

Подводя итог, необходимо подчеркнуть, что перенос тепла в наноструктурах, происходит с использованием механизмов, которые являются аналогами механизмов классической теплофизики.

В тоже время размерные эффекты, которые приводят к значительным изменениям в кинетике переноса, могут существенно повлиять на изменение основных закономерностей, а именно:

- невозможность применения уравнения Фурье для теплопроводности;
- нарушение характера конвективного обмена;
- нарушение законов классического теплового излучения.

Основное влияние размерных эффектов в наноструктурах состоит в изменении динамики электронов, фононов, фотонов и других носителей энергии.

1.2. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СТРУКТУРЫ

Понятие электропроводности является неотъемлемой частью материалов, как одна из их физических характеристик. По этому признаку материалы подразделяются на проводники, полупроводники и диэлектрики.

В качестве факторов, ответственных за классификацию материалов по их способности проводить электрический ток, следует обозначить следующие:

- тип химической связи;
- ширина запрещенной зоны;
- вид свободных носителей заряда, их подвижность и концентрация.

Обозначим основные параметры, характеризующие электрические свойства полупроводниковых материалов:

- удельная электропроводность σ ($\text{Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$);
- удельное электросопротивление ρ (Ом м);
- температурный коэффициент удельного сопротивления (ТКС), α_{ρ} (К^{-1}).

Перейдем к рассмотрению непосредственного объекта работы, а именно к полупроводниковым структурам, оценим их масштабы и свойства.

Взаимосвязь между масштабом и функциональными свойствами, как подчеркивалось в главе «Введение» является определяющей для изделий электроники.

По мере того, как размеры материалов приближаются к атомному масштабу, происходит изменение и в функциях материалов, они утрачивают свойства характерные для макро-размеров и наделяются свойствами наноразмерных структур.

Таким образом, «с уменьшением топологических свойств материала меняются физические законы поведения заряженных частиц – носителей информационных сигналов» [4]

Так как полупроводники являются частью понятия наноструктур, вспомним все особенности, связанные с изменением физических характеристик процессов, относящихся и на их счет:

- происходит замена классических моделей процесса на квантовые, базирующиеся на основе законов квантовой механики (уравнение Шредингера);

- начальные составляющие части системы, такие как электрон, дырка, экситон и иные, а также сама система из атомов могут быть описаны волновой функцией, зависящей от переменных, которые определяют степень свободы системы и которая может рассматриваться как амплитуда вероятности обнаружения частицы в установленных координатах и временном факторе.

Исходя из этого, можно говорить об отсутствии в наном мире, а в нашем случае в мире полупроводниковых материалов, такого понятия как траектория движения частицы, которое теперь описывается с точки зрения квантовых состояний функций.

Рассматривая случай, когда один из геометрических размеров тела, например толщина слоя h по своей величине сравнима с порядком длины волны де Бройля или возможно меньше этого значения, можно говорить о

квантовом размерном эффекте, который связан с квантованием квазиимпульса. Приведем формулу волны де Бройля λ_B ($\lambda_B = (h/2m^*E)^{1/2}$, m^* - эффективная масса электронов, h - постоянная Планка, E - энергия носителей. В полупроводниках λ_B составляет ~ 100 нм,

В таком случае происходит расщепление энергетических зон электронного спектра на подзоны, с образованием зонной структуры вещества, что оказывает безусловное влияние на изменение свойств (функций) электропроводности, теплопроводности, магнитных и оптических свойств.

Рассмотрим типы образовавшихся зон:

- E_v - валентная зона, образовавшаяся в ходе расщепления уровней валентных электронов;

- E_c - зона проводимости, следующая за валентной зоной, и считающаяся зоной разрешенных энергий;

- E_g - запрещенная зона, расположенная между валентной зоной E_v и зоной проводимости E_c

При получении электроном энергии, превышающей ширину запрещенной зоны, он осуществляет переход из валентной зоны в зону проводимости и принимает участие в электропроводности.

В соответствии с зонной теорией, описанной выше, твердые тела можно классифицировать как проводники, полупроводники и диэлектрики.

Полупроводники по своим электрическим свойствам занимают промежуточное состояние между проводниками и диэлектриками с удельным сопротивлением, составляющим 10^{-6} - 10^9 Ом·м и шириной запрещенной зоны от 0,05 эВ до 2,5 - 3 эВ.

Связь атомов в полупроводниках может быть нескольких типов: ковалентной, неполярной, полярной и ионной. Тип электропроводности электронно-дырочный.

Полупроводники имеют отрицательный ТКС (α_p), как и диэлектрики, т.е. при росте температуры ρ полупроводников уменьшается, в то время как ρ металлов увеличивается.

Полупроводники обладают высокой чувствительностью удельного электросопротивления не только к тепловым, но и к иным внешним воздействиям (излучению, электромагнитным полям, давлению и т.д.). Это является важной особенностью полупроводников и обусловлено типом химической связи между атомами в кристаллической решетке полупроводников, а также имеющимися в наличии примесями и иными дефектами, даже при их ничтожной концентрации, так как их наличие оказывает влияние на концентрацию свободных носителей заряда, а следовательно и на электрические свойства материалов.

Применительно к гетероструктурам, к которым относятся полупроводниковые структуры, можно говорить о гетеропереходе, как о базисной строительной единице для гетероструктур.

«Под гетеропереходом будем понимать контакт двух различных по химическому составу полупроводников, при котором кристаллическая решетка одного материала без нарушения периодичности переходит в решетку другого материала» [4].

Граница гетероперехода является важной составной частью гетероструктур, так как именно в ее пределах происходит изменение свойств полупроводникового материала, а именно претерпевают изменения структура энергетических зон, эффективные массы носителей заряда и их подвижность.

В соответствии с принципом образования, гетеропереходы разделяют на изотропные и анизотропные. В случае образования гетероперехода двумя полупроводниками одного типа считаем гетеропереход изотропным. В противном случае, когда гетеропереход образован полупроводниками с разным типом проводимости, считаем его анизотропным.

Среди гетеропереходов можно выделить три модели:

- идеальный гетеропереход;
- неидеальный гетеропереход;
- гетеропереход с промежуточным слоем.

В идеальном гетеропереходе, в отличие от неидеального, на границе раздела материалов наблюдается отсутствие локальных энергетических состояний для электронов. Гетеропереход с промежуточным слоем образован слоем конечной толщины, в котором локальные энергетические состояния могут существовать как в пределах промежуточного слоя, так и на его границах.

При осуществлении контакта двух полупроводников, имеющих разную ширину запрещенной зоны E_{g1} и E_{g2} устанавливается термодинамическое равновесие. В таком состоянии уровень Ферми является единым.

Так если работу выхода полупроводника n-типа обозначить Φ_1 а работу выхода полупроводника p-типа Φ_2 , то контактная разность потенциалов будет определяться по формуле: $V = \frac{1}{q} |\Phi_1 - \Phi_2|$, где q - элементарный заряд.

В совокупности несколько гетеропереходов формируют гетероструктуру с размером до нескольких десятков нанометров.

Как говорилось ранее, движение носителей в гетероструктурах ввиду их малой размерности описывается только с учетом законов квантовой механики. Этот факт позволяет выделить гетероструктуры в особый класс объектов.

Благодаря методам зонной инженерии и инженерии волновых функций возможно производить конструирование структур с заданным электронным спектром и свойствами, которые могут быть затребованы: оптическими, электрическими и др., таким образом создавая эффективные приборы для различного применения.

Производя точную укладку атомов по слоям, возможно получить кристаллы искусственного происхождения, молекулы и атомы, обладающие определенными защитными свойствами.

Если электрон находится в потенциальной яме, его волновую функцию можно рассматривать Ψ как стоячую волну, являющуюся синусоидой и обращающуюся в точках $x=0$ и $x=a$ в ноль:

$$\Psi(x) = \sqrt{\sin \frac{\pi x}{a} n}$$

где n – номер квантового состояния; a – размер ямы.

Интересными с точки их физических свойств являются сверхрешетки, сформированные на основе гетеропереходов, и представляющие собой твердотельную периодическую структуру, в которой помимо потенциала кристаллической решетки дополнительный встроенный потенциал оказывает свое действие на носителя заряда.

В качестве такого потенциала выступает одномерный потенциал $V(z)$, период которого d меньше заявленной длины свободного пробега электрона, но, тем не менее, значительно превышает постоянную решет a .

В таком случае прохождение частиц через систему чередующихся потенциальных барьеров может быть представлено моделью Кронига-Пенни, основой которой является понимание указанной структуры как последовательности прямоугольных барьеров и квантовых ям.

Тогда период d будет рассчитываться по следующей формуле:

$$d = L + W, \text{ а потенциал будет меняться исходя из закона: } V(z) = V(z + d) = V(z + 2d).$$

Для таких структур решение уравнения Шредингера ищется в виде функций Блоха:

$$\psi(z) = V(z) \exp(ikz)$$

, где k – волновой вектор, $V(z)$ – амплитуда блоховской функции.

Проведя анализ решения уравнения, можно увидеть, что энергетический спектр сверхрешетки делится на зоны запрещенных и разрешенных значений энергии, при этом сам энергетический спектр определяется толщиной слоев сверхрешетки, номером зоны i и волновым вектором \bar{V}_z .

Рассматривая полупроводники, можно провести их разделение на две группы: элементарные проводники и полупроводниковые соединения.

Среди принципов классификации полупроводниковых соединений наиболее распространенным является принцип объединения в один класс материалов, которые имеют одинаковую стехиометрическую формулу, образование которых идет за счет объединения двух элементов, каждый из которых представляет определенную группу Периодической системы. Так, например соединения, составленные из элементов II и VI групп Периодической системы относятся к классу A^2B^6 , III и V групп – к классу A^3B^5 и т.д..

Правило маркировки указанных соединений зависит от их расположения в Периодической системе: так элементы, расположенные в группах с наименьшими порядковыми номерами, обозначаются группой «А», а в группах с наибольшими порядковыми номерами – буквой «В».

Помимо двойных (бинарных) полупроводниковых структур существуют соединения, состоящие из 3-х элементов и более.

Образование названия двойных полупроводниковых элементов подчиняется следующему правилу - оно исходит от названия неметаллического компонента: оксиды, сульфиды, фосфиды, арсениды и т.д.

По своему строению данные полупроводниковые соединения представляют собой синтез совокупности атомов металлического компонента, образующих металлическую решетку с совокупностью неметаллической подрешетки в кристаллической решетке соединения.

К числу наиболее важных полупроводниковых соединений следует отнести соединения типа A^3B^5 и A^2B^6 , которые применяются для создания приборов оптоэлектроники.

1.3. АРСЕНИД ГАЛЛИЕВЫЕ СТРУКТУРЫ

Так как второй задачей работы является применение разработанной оптимизационной модели к изучению процесса теплопереноса в арсенид галлиевых структурах типа AlAs/GaAs, вкратце следует рассмотреть с физической точки зрения заявленный объект исследования.

В 1950г., были выявлены полупроводниковые свойства соединений III и V групп Периодической системы химических элементов Л.И. Менделеева, что, безусловно, вызвало неподдельный интерес к ним.

Относительно элементарных полупроводников IV группы, соединения III и V групп позволили получить более широкую линейку основных полупроводниковых параметров, вариационный размер запрещенной зоны и подвижности носителей заряда.

Ионная компонента связи в соединениях A^3B^5 обеспечивает большее значение температуры плавления и ширины запрещенной зоны, по сравнению с ковалентной связью в элементарных полупроводниках IV группы.

В настоящее время A^3B^5 служит базовым компонентом для создания фотоприемников, туннельных диодов, полупроводниковых лазеров, светодиодов, и пр., являющихся быстродействующими малогабаритными источниками и приемниками излучения, обладающими высокой эффективностью излучаемой рекомбинации неравновесных носителей.

Именно это обстоятельство обеспечивает особый интерес к соединениям данной группы.

Полупроводниковые соединения данной группы кристаллизуются в решетки типа сфалерита, т.е. относятся к алмазоподобным. К таким соединениям относятся соединения бора, алюминия, галлия и индия с фосфором (фосфиды), мышьяком (арсениды). Исключение составляют нитридные соединения (соединения с азотом), кристаллизующиеся в решетке гексагонального типа (типа вюрцит).

Соединения A^3B^5 можно назвать ближайшими электронными аналогами кремния и германия, так как каждый элемент III группы находится в тетраэдрическом окружении элементов V группы.

С увеличением среднего атомного номера Z_{cp} и атомных масс компонентов, внутри каждой группы соединений-аналогов, можно проследить уменьшение ширины запрещенной зоны E_g температуры плавления, твердости, а также увеличение пластичности, что вызвано уменьшением ковалентной и увеличением ионной составляющей связи.

1.4. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР

Как было подчеркнуто в разделе «Введение», гетероструктуры и наногетероструктуры представляют специфические объекты для изучения процесса теплопереноса. Для полупроводников важнейшую роль в теплопроводности играют акустические фононы, оказывая влияние на мобильность электрических зарядов.

Как правило, подходы, которые описывают расчет теплопроводности в решетках, в качестве базового уравнения используют уравнение Больцмана для фононов, не забывая при этом провести модификацию применительно к гетероструктурам и наноструктурам, дисперсионным соотношениям для фононов и интерфейсному рассеиванию.

В рамках указанного подхода в отдельных работах исследовался перенос в квантовых ямах, и различных по геометрии слоях-цилиндрическом, нанопроволоках, мульти-слоях.

В данных работах было доказано, что фононное удержание (конфайнмент) и интерфейсное рассеивание служат основой эффективной теплопроводности наноструктур.

Кроме того известно, что фононное удержание и квантование спектра фононов могут производить контроль над акустическим фононным транспортом.

Как ранее было подчеркнуто – для приложений в электронике и оптоэлектронике гетероструктуры имеют крайне важное значение.

В связи с этим стоит подробнее изучить теплопроводность гетероструктур, как имеющую прямое отношение к показателю, относящемуся к наноструктурам, так как толщины слоев гетероструктур составляют размерность порядка несколько нанометров.

Результаты исследования спектров фононов в гетероструктурах неоспоримо доказали, что можно управлять спектром и групповой скоростью фононов, производя изменение толщины слоев и барьерного материала.

Другие опытные данные неоднократно подтверждали сложный механизм процесса переноса тепла в наногетероструктурах.

1.5. АСПЕКТЫ ЗАДАЧИ С ПОЗИЦИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Как было подчеркнуто авторами в [5] «Решение и исследование подавляющего большинства современных задач науки и техники невозможно представить без математического моделирования, под которым обычно понимают набор подходов и методов для построения, исследования и анализа математических моделей тех или иных физических либо технических объектов и процессов».

Применительно к объекту исследования, как правило, математическая модель представляет собой систему уравнений в частных производных, которая отражает существенные особенности поведения объекта.

Необходимыми требованиями для такой системы должно быть наличие следующих обязательных параметров:

- указание области, в которой будет проходить поиск решения;
- указание начальных и граничных условий, которые обеспечат единственность решения.

Дальнейшее развитие наук и технологий, процессы и объекты которых подлежат исследованию и (или) прогнозированию, на данном этапе развития

математического моделирования приводит к построению детальных математических моделей, среди которых возрастает число многомерных нестационарных уравнений с переменными коэффициентами, нелинейные модели.

Как правило, лишь в малом числе случаев возможно решение указанных моделей аналитическими методами.

Именно поэтому в математическом моделировании так широко используются численные методы, позволяющие получить допустимо точное приближенное решение.

Для успешного решения поставленной задачи, вычислитель должен понимать связи (как прямую, так и обратную) между моделью и численными алгоритмами, которые к ней относятся. Таким образом, тщательный выбор математической модели, является одним из главных факторов, наряду с эффективным численным алгоритмом.

2. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1.МОДЕЛЬ.

В качестве базовой модели работы выбрано уравнение, основанное на использовании уравнения Больцмана, над которым будут проведены трансформации, описанные ниже, для достижения результата и которые были приведены в работе [6] и затем подробно представлены в работе [2].

Используем в качестве начального уравнения для проведения расчетов теплопереноса в наногетероструктурах уравнение Больцмана для фононов:

$$\vec{v}_s \cdot \nabla f_s(\vec{k}) = \left[\frac{\partial f_s(\vec{k})}{\partial t} \right]_{st}$$

где v_s – скорость звука; $f_s(\vec{k})$ – функция распределения фононов, s – й ветки; k – волновой вектор; индекс st означает «со столкновениями».

За счет температурного градиента фононы осуществляют дрейф по волновым числам (отображено в левой части уравнения) и сталкиваются между собой, с неоднородностями и границами, что позволяет поддерживать равновесную функцию распределения.

Проведем преобразование за счет модели Коллуэя для объемного материала в которой в качестве базисного уравнения также использовалось уравнение Больцмана в приближении времени релаксации, но учитывались только нормальные процессы между фононами. Доказано, что подобные процессы не могут обеспечить конечную величину теплопроводности. Поэтому чтобы получить теплопроводность конечной величины следует произвести модификацию модели Коллуэя, приняв во внимание резистивные процессы рассеивания, протекающие с потерей импульса, т.е. процессы с перебросом.

Остановимся на модели Коллуэя. В ее основе также лежит решение уравнения Больцмана в приближении времени релаксации. Формула для расчета теплопроводности в модели имеет вид:

$$\lambda = [k_B / (2\pi^2 v)] (k_B T / \hbar)^3 (I_1 + I_2^2 / I_3)$$

где

$$I_1 = \int_0^{\theta_{D_s}/T} \tau_c \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi;$$

$$I_2 = \int_0^{\theta_{D_s}/T} \tau_c / \tau_N \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi;$$

$$I_3 = \int_0^{\theta_{D_s}/T} (1 - \tau_c / \tau_N) \tau_N^{-1} \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi$$

Величина ξ рассчитывается следующим образом: $\xi = \hbar\omega / (k_b T)$; τ_N - время релаксации по нормальным процессам рассеивания; τ_c - комбинированное время релаксации, которое можно вычислить по правилу Маттиссена:

$$\tau_c^{-1} = \tau_U^{-1} + \tau_N^{-1} + \tau_i^{-1} + \tau_b^{-1},$$

где τ_U - время релаксации за счет процессов с перебросом (U - процессов);

τ_i - время релаксации за счет процессов рассеивания на примесях, неоднородностях, дефектах; τ_b - время релаксации при рассеивании на границах.

Перечисленные времена релаксации можно определить исходя из следующих отношений: $\tau_U^{-1} = B_U \omega^2 T \exp -\theta_D / (nT)$; $\tau_N^{-1} = B_N \omega^2 T^3$; $\tau_i^{-1} = A\omega^4$; $\tau_b^{-1} = \nu/L$.

Здесь величина L является характерным размером, перпендикулярным направлению теплового потока; A , B_U ; B_N , n - константы, которые можно определить либо экспериментальным путем, либо вычислить на основе моделей рассеивания.

Воспользовавшись модифицированной моделью Коллуэя с учетом продольных и поперечных фононов, можно рассчитать теплопроводность, значение которой находит хорошее соответствие данным, полученным в ходе эксперимента.

Следовательно, модель Коллуэя можно использовать и в расчетах теплопроводности наноструктур и гетероструктур.

Представим эту модель в виде:

$$\vec{v}_s \cdot \frac{\partial f_s(\vec{k})}{\partial T} \cdot \nabla T = - \frac{f_s^0(\vec{k}) - f_s(\vec{k})}{\tau_s^*(\vec{k})}$$

где индекс s означает продольные акустические (LA) и поперечные (TA) фононы, f_s^0 – равновесная функция распределения;

а $\tau_s^*(\vec{k})$ рассчитывается исходя из следующего соотношения:

$$\tau_s^*(\vec{k}) = (1 + \beta/\tau_{N_s})\tau_s$$

где

$$\beta = \frac{\int_0^{\theta_{D_s}/T} (\tau_s/\tau_{N_s}) \xi^4 \exp(\xi) \{\tau_{N_s} [\exp(\zeta) - 1]^2\}^{-2} d\xi}{\int_0^{\theta_{D_s}/T} (\tau_s/\tau_{N_s} \tau_{R_s}) \xi^4 \exp(\xi) \{\tau_{N_s} [\exp(\zeta) - 1]^2\}^{-2} d\xi}$$

τ_s^{-1} – обратное комбинированное время релаксации выступает как сумма обратных времен релаксации для нормальных процессов (не резистивных τ_{N_s} и резистивных τ_{R_s}) $\tau_s^{-1} = \tau_{N_s}^{-1} + \tau_{R_s}^{-1}$;

θ_{D_s} - температура Дебая s -й ветви;

ξ – переменная интегрирования.

Проведем исследование теплопроводности внутреннего слоя, который лежит в границах от $z=0$ до $z = l_w$, где l_w - толщина слоя.

В случае внутреннего слоя градиент температуры направлен вдоль оси x . Тогда, уравнение Больцмана для фононов, принимает вид:

$$v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_s^0(\vec{k})}{\partial T} + v_{sz} \frac{\partial \delta f_s(\vec{k})}{\partial z} + \frac{\delta f_s(\vec{k})}{\tau_s^*} = 0 \quad (1)$$

где v_{sx} , v_{sz} – скорости фононов по осям x и z соответственно, f_s^0 = равновесная функция распределения.

Представим гетероструктуру в своем базовом состоянии как структуру, имеющую три слоя: внутренний слой шириной l_w и находящийся между двумя барьерными слоями, имеющими одинаковую толщину l_b .

Используя метод Фукса-Зондхеймера, уравнение (1) можно записать в виде:

$$\delta f_{\vec{k},s}^-(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \{1 + \psi(\vec{v}_{\vec{k},s}) \exp[-z/(\tau_s^* v_{sz})]\} \quad (2)$$

где ψ – является некоторой функцией.

Вводим параметры рассеивания p^+ , p^- , которые показывают вероятность зеркального отражения от верхней границы ($z=l_w$) и нижней ($z=0$). Значения $(1 - p^+)$, $(1 - p^-)$ показывают вероятности отражения от указанных границ диффузионно.

Равенство (2) можно переписать, используя указанные формы решения:

$$\delta f_{\vec{k},s}^+(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* \cdot v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \Theta^+(p^+, p^-, v_{sz}) \quad (v_{sz} > 0);$$

$$\delta f_{\vec{k},s}^-(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* \cdot v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \Theta^-(p^+, p^-, v_{sz}) \quad (v_{sz} < 0);$$

где,

$$\Theta^+(p^+, p^-, v_{sz}) = 1 - \left[\frac{(1 - p^-) + p^-(1 - p^+) \exp(-l_w/\tau_s^* v_{sz})}{1 - p^+ p^- \exp(-2 l_w/\tau_s^* v_{sz})} \right] \exp[(-z/(\tau_s^* v_{sz})] \quad (3)$$

$$\Theta^-(p^+, p^-, v_{sz}) = 1 - \left[\frac{(1 - p^+) + p^+(1 - p^-) \exp(l_w/\tau_s^* v_{sz})}{1 - p^+ p^- \exp(2 l_w/\tau_s^* v_{sz})} \right] \exp[(l_w - z)/(\tau_s^* v_{sz})]$$

Проведя трансформации определенного уровня, можно вычислить фононную теплопроводность:

$$q_s = -\frac{1}{l_w} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{D_s}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\zeta) - 1]^2} d\xi \cdot I(p^+, p^-, \eta(\xi))$$

где,

$$I(p^+, p^-, \eta(\xi)) = \int_0^{l_w} dz \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi \int_0^{\pi/2} \Theta^+ \sin^3 \theta d\theta + \int_{\pi/2}^{\pi} \Theta^- \sin^3 \theta d\theta \quad (4)$$

где ϕ – азимутальный угол; θ - полярный угол.

Подставив функции (3) и (4) в выражение для теплопроводности, получим:

$$q_s = -\frac{4\pi}{3} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{D_s}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\zeta) - 1]^2} [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

где,

$$\gamma(\eta(\xi), p^+, p^-) = \int_0^{\pi/2} \frac{[1 - \exp(-\eta_s(\xi)) / \cos \theta]}{1 - p^+ p^- \exp(-2\eta_s(\xi)) / \cos \theta} \times \\ \times [2 - p^+ - p^- + (p^+ + p^- - 2p^+ p^-) \exp(-\eta_s(\xi)) / \cos \theta] \cos \theta \sin^3 \theta d\theta d\phi$$

Здесь $\eta_s = l_w / \Lambda_s^* = l_w / (\tau_s^* v_s)$ – средняя длина свободного пробега фононов, соответствующая времени релаксации τ_s^* . Отсюда получаем теплопроводность внутреннего слоя ($\lambda_{ws} = -\vec{q}_s / \nabla T$) для LA- и TA-мод соответственно:

$$\lambda_{ws} = \frac{k_B}{6\pi^2} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{D_s}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\zeta) - 1]^2} [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

Вводя дебаевскую плотность числа состояния фононов $D_s^D = \omega^2 / (2\pi^2 - v_s^2)$ перепишем последнюю формулу как:

$$\lambda_{ws} = \frac{1}{3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right) k_B T \int_0^{\theta_{D_s}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\zeta) - 1]^2} \cdot D_s^D \\ \cdot [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

Общую теплопроводность, полученную от вклада всех поляризаций (одна продольная – LA и две поперечные – TA) можно записать в виде $\lambda_w = \lambda_{wLA} + \lambda_{wTA}$. Отметив, что если $p^+, p^- > 1$, $(1 - (3/4) \gamma) > 1$, приходим к выражению для теплопроводности объемного тела

$$\lambda_o = \sum_s \frac{1}{3} \frac{k_B}{\hbar} k_B T \int_0^{\theta_{D_s}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} D_s^D d\xi$$

где,

k_B – постоянная Больцмана, $= 1,380649 \cdot 10^{-23}$ Дж/к

\hbar - постоянная Дирака $= h/2\pi$, где h – постоянная Планка $= 6,62607015 \cdot 10^{-34}$ кг· м²· с⁻¹ (Дж с)

ξ – переменная интегрирования $\xi = \hbar\omega/(k_b T)$

θ_{D_s} – фононная энергия на границах $\theta_{D_s} = \hbar\omega_s(k_{max})/k_B$

Частота колебаний $\omega = \sqrt{\frac{2g}{m}} (1 - \cos ka)^{1/2}$, где a - межатомное расстояние,

k – волновой вектор, g – упругая константа; или в приближении Дебая

принимается что $\omega = v_s k$, где v_s – скорость звука в кристалле;

v_s - скорость звука, $v_s = \lim_{(k \rightarrow 0)} d\omega/dk$ волновой вектор k который

$k_x, k_y, k_z = 0; \pm 2\pi/L; \pm 4\pi/L; \dots \dots; \pm N\pi/L$; где L – размер кристаллов по каждому из направлений, k – волновой вектор, N – число атомов.

$D_s^D = \omega^2/(2\pi^2 - v_s^2)$ Дебаевская плотность числа состояний фононов

Подходы, учитывающие сложный механизм рассеивания (базирующийся на понятии о кнудсоновском течении фононов), который можно наблюдать в слоях гетероструктур, позволили нам получить модель, способную эффективно вычислять теплопроводность многослойных гетероструктур.

2.2. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

Расчетным путем не удалось доказать релевантность модели, в связи с сложностью обработки выбранного уравнения модели.

2.3. АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ МОДЕЛИ

Рассмотрим иные подходы к моделированию процесса теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах.

Так в статье авторов К.К. Абгарян и И.С. Колбина «Расчет теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах» (2018г.) процесс теплопереноса описан с позиций, когда распределение тепла предполагалось постоянным внутри слоя, при этом температура ступенчато изменялась на интерфейсах слоев. Внешние границы структуры считаются изолированными, что достигнуто путем обнуления значений тепловой проводимости для начального и конечного слоя. Задача ставилась как расчет температуры по слоям наноразмерной гетероструктуры состава AlAs/GaAs. Расчет производился для одинаковой толщины слоев. В качестве метода решения авторы использовали гибридный конечно-разностный нейросетевой алгоритм. В работе было справедливо подмечено о значении роли интерфейсов – граничных областей между слоями, как основных барьерах для теплопереноса в гетерогенных наноструктурах.

В качестве модели, имеющей иной подход, теми же авторами в статье «Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов» (2019г.) была рассмотрена модель, при которой процесс теплопереноса рассматривался с позиций решения кинетического уравнения Больцмана для фононов с учетом приближенного времени релаксации.

Основным вопросом в данной работе был вопрос, связанный с получением данных по параметрам релаксации, который был успешно решен

с помощью первопринципных расчетов. Необходимые данные были получены из открытой библиотеки проекта ALMA. Моделирование производилось с использованием программного пакета almaVTE. Расчет эффективного коэффициента теплопроводности был осуществлен с помощью функции модального подавления. Было показано, что учет послойного распределения материалов позволяет достигнуть для вычисленных результатов наилучшего соответствия экспериментальным данным.

Однако авторы также подчеркивали, что в данном случае при расчете учитывались «идеальные» границы между слоями, что не могло не повлиять на результаты вычислений, так, например, было выявлено существенное расхождение между вычисленными и полученными в ходе эксперимента данными на образце с периодом решетки 10. В работе также был проведен расчет с учетом не идеальности границ для образца с периодом 10, который показал значительно лучшее согласие с экспериментом. Далее на Рисунок 2.1 приводится алгоритм расчета в программном комплексе almaVTE.



Рисунок 2.1 Алгоритм расчетов с использованием программного пакета almaBTE

ВЫВОДЫ

Были рассмотрены различные математические модели и алгоритмы, применяемые для изучения теплопереноса в арсенид галлиевых наноструктурах.

Принципиальным по мнению автора работы является необходимость учитывать рассеяние фононов как внутри слоев гетероструктуры так и на границе (интерфейсе). Автор поддерживает положения, отмеченные в работе [9], а именно применительно к сверхрешеткам (к которым относятся и структуры AlAs/GaAs) будем считать следующее:

Для термического сопротивления сверхрешетки возможно несколько вариантов поведения:

- 1) Возможна интерференция волн, отраженных от разных интерфейсов, которая приводит к разрывам частотных распределений фононов. Такое положение наблюдается в случае, если средняя длина свободного пробега превышает период более чем в 10 раз;
- 2) Если средняя длина свободного пробега не достаточна для разрыва частот, то решающим влиянием на термическое сопротивление решетки будет оказывать единичный интерфейс.
- 3) Для термического сопротивления многослойной системы безусловное влияние оказывает период решетки и зависимость теплопроводности от материалов. Увеличение периода решетки до определенных границ (пока толщина слоя не превысит порогового значения) приводит к увеличению теплопроводности. Однако в случае, если период решетки становится больше критической толщины, которая равна длине свободного пробега фононов, рост теплопроводности больше не наблюдается.

Именно сочетание всех указанных факторов для внесения в модель теплопереноса, позволит создать модель, способную дать вычисленные данные

максимально приближенные к данным, полученным экспериментальным путем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Осуществлен обзор современных тенденций по моделям теплопереноса в многослойных структурах.
- Изучены различные математические модели и алгоритмы, применяемые для изучения теплопереноса в арсенид галлиевых наноструктурах.
- Проанализированы достоинства и недостатки рассмотренных моделей и предложены подходы к решению поставленной задачи.

Список источников

- [1] Г.Г. Бондаренко, Т.А. Кабанова, В.В. Рыбалко, Основы материаловедения, Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.
- [2] А.С. Дмитриев, Введение в нанотеплофизику, Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.
- [3] П. Бутягин, Химическая физика твердого тела, Москва: Издательство Московского университета, 2006.
- [4] А. Щука, Нанoeлектроника, Москва: Лаборатория знаний, 2015.
- [5] Е. С. М.П. Галанин, Методы численного анализа математических моделей, Москва: Издательство МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2018.
- [6] Н. Р. Ziambaras E., Phonon knudsen flow in nanostructured semiconductor systems, Journal Applied Physics, 99.054303.2006.
- [7] К.К. Абгарян, И.С. Колбин, «Расчет теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах,» *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.*, 3 2018.
- [8] Абгарян К.К., Колбин И.С., «Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов,» *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.*, 4 2019.
- [9] С.Ю. Меснянкин, А.Г. Викулов, Д.Г. Викулов, «Современный взгляд на проблемы теплового контактирования твердых тел,» *Успехи физических наук. Приборы и методы исследований*, 9 2009.