08

Распространение тепла в многослойных наноструктурах

© *В.И. Хвесюк*

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
E-mail: 2636623@gmail.com

Поступило в Редакцию 17 февраля 2016 г.

Рассматривается распространение тепла в сверхрешетках — одномерных структурах, состоящих из большого числа наноразмерных тонких слов. Предложен метод расчета таких структур.

Сверхрешетками называются структуры, состоящие из нанопленок двух различных материалов A и B, располагающихся попеременно $A \to B \to A \to B \to \dots$ и находящихся в тепловом контакте друг с другом. Толщины каждого материала одинаковы во всей структуре, но могут быть различными для разных материалов. Такие структуры представляют большой практический интерес в оптике [1], микроэлектронике [2], термоэлектрическом преобразовании энергии [3] и других областях. Все эти устройства изготавливаются из полупроводников, поэтому переносчиками тепла являются фононы — кванты акустических волн. Толщины пленок в сверхрешетках δ_i меньше длины свободного пробега фононов в макроскопическом образце l_∞ . Важной особенностью переноса тепла в таких пленках является зависимость так называемой эффективной теплопроводности от δ: $k_{eff}(\delta)$ [4–7]. Другой особенностью таких структур является необходимость учета теплового контактного сопротивления между соседними пленками. Это так называемые сопротивления Капицы $h_{i,i+1}$, [8]. Как известно [9], на границах контакта соседних слоев возникает разность температур $(T_i - T_{i+1})$, которая связана с тепловым потоком q через поверхность контакта соотношением $q = \sigma_{i,i+1}(T_i - T_{i+1})$, где $\sigma_{i,i+1}$ — проводимость Капицы [9,10]: $\sigma_{i,i+1} = h_{i,i+1}^{-1}$.

Далее вводится безразмерный параметр, характеризующий отношение теплового сопротивления слоя $h_{\delta i} = \delta_i/\kappa_{eff}^i$ к сопротивлению Капицы одного из интерфейсов, с соседним слоем $h_{i,i+1}$: $\xi_i = h_{\delta i}/h_{i,i+1}$, $\xi_{i+1} = h_{s i+1}/h_{i+1,i+2}$.

Задачей данной работы является разработка методов расчета температурных полей в сверхрешетках для случаев, когда реализуется баллистический ($\xi_i = 0$) или диффузионно-баллистический ($\xi_i \leqslant 1$) режимы переноса тепла в каждом слое многослойной наноструктуры.

Рассмотрим сначала перенос тепла в тех случаях, когда можно пренебречь тепловыми потерями внутри всех слоев, образующих сверхрешетку $\xi_i \ll 1$, $\xi_{i+1} \ll 1$. Тогда все тепловое сопротивление цепочки определяется суммой сопротивлений Капицы, а температура внутри каждого слоя принимается постоянной [11]. Предлагается метод расчета температурных полей в упорядоченных многослойных одномерных наноструктурах. Упорядоченность означает, что значения геометрических размеров и теплофизических свойств всех пленок известны. Распространение тепла анализируется в нестационарном приближении. Предполагается, что сопротивления Капицы известны и в рассматриваемом ниже приближении не зависят от каких-либо внешних параметров. Теплоемкости слоев считаются величинами постоянными, не зависящими от температуры. Допускается, что в общем случае проводимости (сопротивления) Капицы на границе двух материалов различны для различных направлений теплового потока. Поэтому далее проводимость между материалами 1 и 2 обозначается $\sigma_{1,2}$, если тепловой поток направлен от материала 1 к 2, и $\sigma_{2,1}$, если тепловой поток распространяется в обратном направлении.

Далее в приближении $\xi = 0$ анализируется баланс тепла в одной ячейке. В качестве ячейки принимаем совокупность последовательности трех пленок, находящихся в контакте друг с другом и соответственно двух интерфейсов. Изменение температуры слоя со временем определяется переносом тепла через интерфейсы. В соответствии с вышесказанным тепловой поток через интерфейс записывается так:

$$q = \sigma_{i-1,i}(T_{i-1} - T_i). \tag{1}$$

Площади всех слоев принимаются одинаковыми.

В нестационарных условиях баланс энергии для элемента i в течение интервала времени $\Delta\tau$ имеет вид

$$[\sigma_{i-1,i}(T_{i-1} - T_i) - \sigma_{i,i+1}(T_i - T_{i+1})]\Delta\tau = C_i \nu_i \Delta T_i.$$

Здесь C_i — удельная объемная теплоемкость, ν_i — объем слоя, ΔT_i — изменение температуры слоя в течение времени $\Delta\tau$ за счет поступления (оттока) тепла. Устремляя $\Delta\tau$ к нулю, получаем дифференциально-разностное уравнение

$$\frac{dT_i}{dt} + (a_{i-1} + a_i)T_i = a_{i-1}T_{i-1} + a_i T_{i+1}. \tag{2}$$

Здесь $a_i = \sigma_{i,i+1}/C_i\nu_i$ и аналогично a_{i-1}, a_i. Расчет температурного поля в структуре из n элементов сводит задачу к решению системы из $n-2$ этих уравнений. Кроме того, ставится начальное условие, а также записываются два уравнения для крайних элементов системы с учетом условий теплообмена на внешних границах. Таким образом, в приближении $\xi = 0$ система уравнений (2) служит для определения постоянных температур каждого слоя.

Представляет интерес сравнить распределение температур в сверхрешетке с однородным плоским образцом, имеющим ту же толщину и те же интегральные теплофизические свойства (тепловое сопротивление и теплоемкость), что и сверхрешетка. Такой образец можно назвать эквивалентным однородным образцом. Толщина b его достаточно велика, чтобы можно было использовать для определения поля температур в нем уравнение теплопроводности $b \gg l_\infty$. Это возможно, если число слоев составляет 1000 и больше.

В соответствии со сказанным выше параметры такого образца следующим образом связаны с параметрами сверхрешетки. Толщина образца

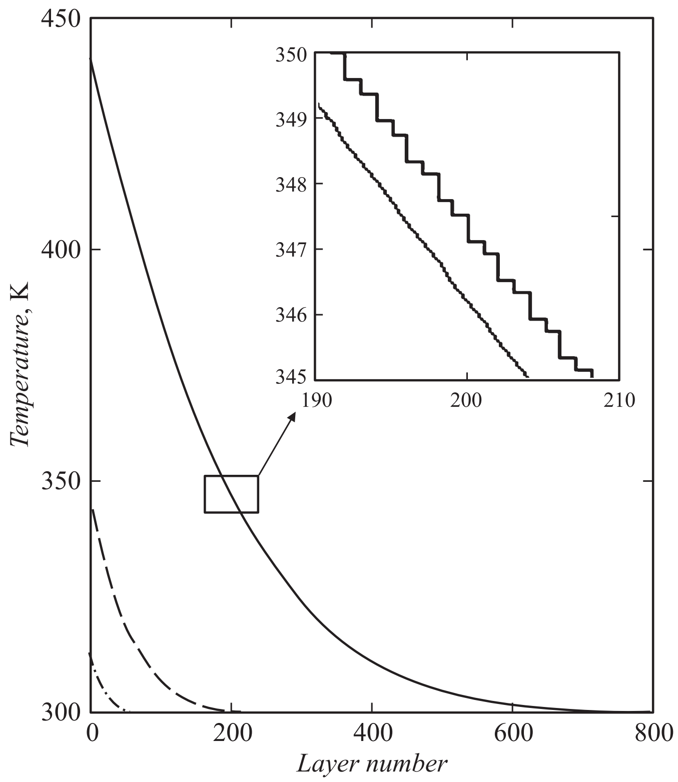
$$b = \sum_{i=1}^{n} \delta_i, \tag{3}$$

где δ_i — толщины слоев, n — полное число слоев. Коэффициент теплопроводности эквивалентного однородного образца λ определяется из выражения

$$\frac{b}{\lambda} \sum_{i=1}^{n-1} h_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\sigma_{i,i+1}}. \tag{4}$$

Здесь суммирование ведется по числу интерфейсов i. Удельная теплоемкость образца

$$C = \frac{1}{b} \sum_{i=1}^{n} \delta_i C_i. \tag{5}$$



Распределение температур в сверхрешетке в разные моменты времени. На вставке представлены результаты расчетов с использованием уравнения (2) (ступенчатая кривая) и с использованием уравнения теплопроводности (сплошная кривая) для эквивалентного образца, характеристики которого определяются из характеристик сверхрешетки по уравнениям (3), (4), (5). Три кривые соответствуют моментам времени 10^{-9}, 10^{-8} и 10^{-7} s.

Рассматриваются полупроводниковые структуры, состоящие из последовательно расположенных слоев двух разных материалов, составляющих периодическую структуру из 1000 слоев одинаковой толщины. Все расчеты выполнены при начальном условии постоянной температуры. Условия теплообмена с внешней средой — заданный постоянный тепловой поток с одной стороны и теплоизолированная $(dT/dx = 0)$

другая сторона образца. Теплоемкости взяты из [12]. Используем далее уравнение (2) для расчета температур элементов сверхрешетки.

Результаты расчета по (2) для сверхрешетки и для эквивалентного образца при использовании уравнения теплопроводности представлены на рисунке. Видно, что расчеты для многослойной структуры и для эквивалентного образца дают очень близкие результаты.

Рассмотрим теперь случай, когда $\xi \leqslant 1$, т.е. тепловые сопротивления слоев и интерфейсов одного порядка. В стационарном случае разность температур на границах произвольного слоя определяется из выражения

$$(\Delta T)_i = \frac{q\delta_i}{\kappa^i_{eff}(\delta_i, T_i)},$$

где q — одинаковый для всех слоев удельный тепловой поток, поступающий в некоторый слой i; T_i — температура середины слоя i. Соответственно разности температур на поверхностях контакта соседних слоев определяются из (1). Зависимости $\kappa_{eff}(\delta, T)$ как для пленок (вдоль и поперек), так и для нанонитей определены экспериментально и теоретически во многих работах. Характер зависимостей от толщины пленки и диаметра нитей приблизительно одинаков во всех изученных случаях [6–7,13–16].

В нестационарном приближении последняя формула записывается так:

$$[\Delta T(t)]_i = \frac{q_i(t)\delta_i}{\kappa^i_{eff}[\delta_i, T_i(t)]}.$$

Здесь в качестве $T_i(t)$ используется температура середины слоя, определяемая в ходе решения задачи. Принимается, что распределение температур внутри каждого слоя линейное в силу малой толщины пленок.

К сожалению, экспериментальные данные, с которыми можно было бы сравнить данные расчета, отсутствуют, так как в лучшем случае имеются зависимости теплопроводности сверхрешеток от их периода, т.е. от суммы $\delta_1 + \delta_2$, но не указываются по отдельности величины δ_1 и δ_2 [17,18]. При наличии полных экспериментальных данных можно было бы определить суммарные значения сопротивлений Капицы для различных сверхрешеток. Очень интересные экспериментальные данные, согласно которым теплопроводность сверхрешеток в зависимости от их периода немонотонна [17,18]. Довольно подробно возможные причины наблюдаемой немонотонности обсуждаются в [18].

Результаты данной работы показывают принципиальную возможность развития методов расчета полей температур в сложных упорядоченных наноструктурах. В то же время их широкое применение возможно только при условии знания теплофизических свойств таких устройств, для чего необходимо развитие эффективных методов экспериментального определения как свойств слоев, так и тепловых контактных сопротивлений.

Список литературы

[1] *Duan X.F.* et al. // Nature (London). 2001. V. 409. P. 66.
[2] *Huang Y.* et al. // Science. 2001. V. 294. P. 1313.
[3] *Lin Y.-M., Dresselhaus M.S.* // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 075 304 (1–14).
[4] *Гуржи Р.Н.* // УФН. 1968. Т. 94. С. 689–719.
[5] *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
[6] *McGaughey* et al. // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99. P. 131 904 (1–3).
[7] *Dong Y., Cao B.-Y., Guo Z.-Y.* // Physica. E. 2015. V. 66. P. 1–6.
[8] *Kapiza P.L.* // J. Phys. (Moscow). 1941. V. 4. P. 181–183.
[9] *Халатников И.М.* Введение в теорию сверхтекучести. М.: Наука, 1965. 158 с.
[10] *Gahill D.G.* et al. // Appl. Phys. Rev. 2014. V. 1. N 1. P. 011 305 (1–44).
[11] *Cahill D.G.* et al. // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. N 2. P. 793–818.
[12] Sadao Adashi. Properties of Semiconductors Alloys: Group-IV, III-V, II-IV Semiconductors. Chippelham: John Wiley and Sons, Ltd., 2009. 400 p.
[13] *Ma Y.* // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 101. P. 211 905 (1–4).
[14] *Maldovan M.* // J. Appl. Phys. 2011. V. 110. P. 034 308 (1–6).
[15] *Maldovan M.* // J. Appl. Phys. 2012. V. 111. P. 024 311 (1–6).
[16] *Alvarez F.X., Jou D.* // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. P. 083 109 (1–3).
[17] *Chakraborty S.* et al. // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 83. P. 4184–4186.
[18] *Lee S.-M.* et al. // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70. P. 2957–2959.