МОДЕЛЬ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В КРЕМНИЕВЫХ НЕОДНОРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

В.И. Белько
Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, Минск 220030, Беларусь, belko@bsu.by

Решена задача о распространении тепла в неоднородной кремниевой нанопроволоке с учетом граничных условий третьего рода на границах между кремнием и оксидом. Условия на внешних границах сформулированы так, чтобы количество тепла, приходящее в образец в единицу времени, было равно количеству тепла, уходящего через эти границы. Установлено: если на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм расположены слои аморфного диоксида кремния по 3 нм, то в этом случае после выхода на стационар температура на границах равна 166.7 К. Если слои диоксида имеют толщину по 2 нм на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм, то температура на границах в квазистационарном состоянии равна 198 К. Слои SiO_2 по 1 нм приводят к итоговой температуре на границах 234 К.

Ключевые слова: теплоперенос; нанопроволока; моделирование; уравнение теплопроводности; граничные условия.

MODEL OF HEAT TRANSFER IN SILICON INHOMOGENEOUS NANOSTRUCTURES

Viktor Belko
Belarusian State University,
4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, belko@bsu.by

A modeling technique and algorithm have been developed to describe the thermal properties of nanoscale silicon nanowires, which is based on a numerical solution of the initial boundary value problem for partial differential equations. When using the condition of continuity of the temperature distribution function, the following results were obtained. (1) If layers of amorphous silicon dioxide of 3 nm are located at the ends of a silicon wire with a length of 10 nm, then in this case, after reaching the stationary state, the temperature at the boundaries is 166.7 K. (2) If SiO_2 layers of 2 nm at the ends of a silicon wire with a length of 10 nm, then the temperature at the boundaries in the stationary state The system is equal to 198 K. (3) SiO_2 layers of 1 nm each lead to a final temperature at the boundaries equal to 234 K. Calculations were also performed when setting the problem with a solution gap at the boundaries of the layers, when the temperature distribution function at the interface had a gap proportional to the heat flow. In this case, the temperature in the silicon part of the nanowire is higher than in the first case, when the conditions of continuity of the temperature distribution function are met.

Keywords: heat transfer; nanowire; modeling; equation of thermal conductivity; boundary conditions.

Введение

Кремниевые нанопроволоки являются одной из базовых структур для новых поколений КМОП-транзисторов. В таких структурах из-за размерных ограничений на процесс переноса фононов и эффектов их рассеяния на границах существенно снижается теплопроводность, что является существенным фактором для многих аспектов их применения в качестве устройств, а также при их изготовлении.

Точное теоретическое описание процесса переноса тепла в наномасштабе опирается либо на прямое решение уравнения переноса Больцмана для фононов, либо на атомистическое моделирование в рамках молекулярной динамики. Для сложных структур моделирование переноса тепла может быть выполнено более экономным и менее точным способом – на основе численного решения уравнения в частных производных, при задании соответствующих источников тепла и граничных условий.

В данной работе рассматривается осевой теплоперенос вдоль кремниевой нанопроволоки, торцы которой покрыты слоями аморфного оксида кремния. Образец равномерно нагревается в кремниевой области, при этом тепло рассеивается только через внешние торцы слоев оксида. Сформулирована и решена одномерная задача о распространении тепла в данной неоднородной нанопроволоке с учетом граничных условий третьего рода на границах между кремнием и оксидом. Условия на внешних границах сформулированы так, чтобы количество тепла, приходящее в образец в единицу времени, было равно количеству тепла, уходящего через эти границы.

Результаты и их обсуждение

Сформулируем задачу о распространении тепла в неоднородной нанопроволоке, используя граничные условия третьего рода на границах кремний-оксид. Чтобы получить в пределе выход на некоторое стационарное распределение температуры, будем считать, что количество тепла, приходящее в образец в единицу времени, равно количеству тепла, уходящего через внешние границы.

$$c \cdot \rho \cdot U_t = \frac{\partial}{\partial z}\left(k(z)\frac{\partial u}{\partial z}\right) + Q(z)$$

$$U|_{t=0} = T_0$$

$$U_{z|z=0} = q_1, U_{z|z=l} = -q_1$$

Введем для времени условные единицы таким образом, чтобы выполнялось равенство $c \cdot \rho = 1$. Проинтегрируем дифференциальное уравнение по z:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^l u(t,z)dz = k(z)\frac{\partial u}{\partial z}\bigg|_0^l + \int_0^l Q(z)dz =$$

$$= -2\bar{k}q_1 + \int_0^l Q(z)dz \qquad (2)$$

$$\bar{k} = k|_{z=0} = k|_{z=l}$$

Для выполнения условия баланса тепла выберем величину q_1 так, чтобы выполнялось равенство:

$$-2\bar{k}q_1 + \int_0^l Q(z)dz = 0$$

Выражение для источника тепла Q(z) имеет вид:

$$Q = \begin{cases} 0 \text{ при } z < x_1 \\ Q_0 \text{ при } x_1 < z < x_2 \\ 0 \text{ при } z > x_2 \end{cases}$$

Решаем задачу методом конечных разностей (использовалась чисто неявная схема и метод прогонки для решения систем линейных уравнений). Решение выходит на стационар через ~20 ед. времени. На рис. 1 представлено полученное стационарное распределение температуры для начальной температуры образца $T_0 =$ 300 К и двух значений толщины слоя оксида: 1 нм и 3 нм.

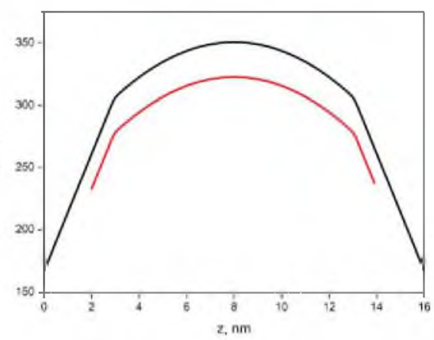

Рис. 1. Стационарное распределение температуры. толщина слоя оксида 1 нм (красная линия) и 3 нм (черная линия)

Если на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм расположены слои аморфного диоксида кремния по *3 нм*, то в этом случае после выхода на стационар температура на границах равна 166,7 К (160 К – результат, полученный методом молекулярной динамики [1]).

Если слои SiO_2 по 2 нм на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм, то температура на границах в стационарном состоянии системы равна 198 К (180 К – МД [1]). Слои SiO2 по 1 нм приводят к итоговой температуре на границах, равной 234 К (200 К – результат МД [1]).

Рассмотрим далее постановку задачи с разрывом решения на границах между слоем кремния и слоями оксида. Как сказано выше, границами раздела слоев являются точки $z=x_1$, $z=x_2$. Следуя работе [2], потребуем, чтобы на границах выполнялись условия непрерывности потока тепла, а функция распределения температуры имела разрыв, пропорциональный потоку и равный $\mu k_2 U_z$, где $\mu = k_1/\lambda_1 + k_2/\lambda_2$, и где, в свою очередь, λ_1 = 59,6 нм и λ_2 = 30,2 нм (средняя длина свободного пробега фононов в кремнии и в оксиде, соответственно):

$$k_2 U_{z|z=x_1-0} = k_1 U_{z|z=x_1+0}$$

$$U_{|z=x_1+0} - U_{|z=x_1-0} = \mu\, k_2 U_{z|z=x_1}$$

$$k_2 U_{z|z=x_2-0} = k_1 U_{z|z=x_2+0}$$

$$U_{|z=x_2+0} - U_{|z=x_2-0} = \mu\, k_2 U_{z|z=x_2}$$

На рис. 2 представлен результат численного расчета для случая разрыва решения на стыке слоев кремний-оксид (на каждом временном шаге система линейных уравнений решалась методом Гаусса).

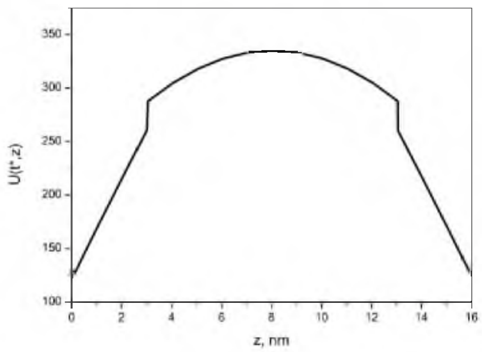

Рис. 2. Стационарное распределение температуры в случае решения задачи с разрывами решения на границах между слоями (толщина слоя оксида 3 нм)

Заключение

Таким образом, была разработана методика и алгоритм моделирования для описания тепловых свойств наноразмерных кремниевых нанопроволок, которая основана на решении начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности.

При использовании условия непрерывности функции распределения температуры, были получены следующие результаты. (1) Если на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм расположены слои аморфного диоксида кремния по 3 нм, то в этом случае после выхода на стационар температура на границах равна 166,7 К. (2) Если слои SiO_2 по 2 нм на торцах кремниевой проволоки длиной 10 нм, то температура на границах в стационарном состоянии системы равна 198 К. (3) Слои SiO_2 по 1 нм приводят к итоговой температуре на границах, равной 234 К.

Также были проведены расчеты при постановке задачи с разрывом решения на границах слоёв, когда на границе раздела функция распределения температуры имела разрыв, пропорциональный тепловому потоку. При этом температура в кремниевой части нанопроволоки оказывается выше, чем в первом случае, когда выполнены условия непрерывности функции распределения температуры.

Библиографические ссылки

1. Bejenari I., Burenkov A., Pichler P., Deretzis I., Sciuto A., La Magna A. Molecular dynamics simulations supporting the development of a continuum model of heat transport in nanowires. *27th International Workshop on Thermal Investigations of ICs and Systems (THERMINIC)*, Berlin 2021: 1-6.
2. Sciuto A., Deretzis I., Fisicaro G. Phononic transport and simulations of annealing processes in nanometric complex structures. *Physical Review Materials* 2020; 4: 056007(1-6).