

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В. И. Белько<sup>1</sup>, В. Е. Гусаков<sup>2</sup>, Н. Н. Дорожкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, [belko@bsu.by](mailto:belko@bsu.by)

<sup>2</sup>ГНПО Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

### ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование технологических процессов производства полупроводниковых устройств стало важной составляющей частью современной индустрии. В настоящее время имеет место переход к наноразмерным элементам в микроэлектронике. При этом чрезвычайно высокая плотность тока, а также высокая степень компоновки электронных устройств, приводит к целому ряду проблем, например, существенному нагреванию отдельных устройств и целых интегральных схем. Проблема высокой температуры в интегральных схемах становится одной из важнейших для наноразмерной электроники и будет еще более важной в связи с внедрением новых трехмерных схем.

Традиционные методы численного моделирования, которые используются для макроскопических объектов, не могут быть непосредственно применены при моделировании наноразмерных устройств. Например, при моделировании теплопереноса главная трудность заключается в том, что доминирующий механизм переноса тепла основан на образовании и движении фононов. У фононов, которые являются волнами атомных колебаний, есть широкий спектр длин волн, и этот спектр зависит от состава, геометрии и других свойств данного устройства. Коротковолновые фононы легко образуются в электронных устройствах во время переноса электронов, в то время как фононы с большой длиной волн являются наиболее эффективными для переноса тепла.

Есть ряд эффектов, которые являются характерными для теплопереноса в наноразмерных устройствах. Во-первых, эффективная тепловая проводимость тонких кремниевых слоев намного ниже, чем проводимость сплошного кремния. Во-вторых, если в электронном устройстве появляется горячая локальная зона размером порядка десяти нанометров, распределение температуры имеет резкий скачок на границе этой зоны. Третий важный эффект – контактное тепловое сопротивление на стыке разнородных слоев.

Метод молекулярной динамики идеально подходит для моделирования тепловых эффектов в наноразмерных структурах. Наибольший интерес представляет моделирование теплового потока через тонкие слои кремния и изолятора толщиной в несколько миллимикрон, что является типичной ситуацией для затворов в кремниевых КМОП-устройствах.

Имеются три основных метода вычисления параметров теплопроводности с использованием молекулярно-динамического моделирования [1] (i) равновесный подход, основанный на методе Green-Kubo; (ii) неравновесный прямой метод, основанный на порождении температурного градиента с помощью источника и стока тепла; (iii) гомогенный неравновесный прямой метод, в котором индуцируется поток тепла

без формирования температурного градиента; при этом можно использовать периодические граничные условия подобно равновесному подходу.

В данной работе выполнен молекулярно-динамический расчет параметров теплопроводности в кремниевых наноструктурах с использованием неравновесного прямого метода.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим образец модельного кристалла кремния в виде прямоугольного параллелепипеда. Для данной задачи параллелепипед должен быть вытянут в направлении  $x$ , вдоль которого будет искусственно формироваться температурный градиент следующим образом. В области параллелепипеда, прилегающей к его правому концу, генерируем входящий тепловой поток (увеличивая скорости частиц в соответствии с требуемой величиной потока), а на левом конце – аналогичным образом порождаем сток тепла. Предварительно модельный кристалл должен быть приведен в равновесие при заданной температуре (в данной работе – 300 К) в течение достаточно долгого времени. После относительно долгого процесса моделирования с фиксированными потоками тепла в образце формируется температурный градиент. В результате можно оценить коэффициент теплопроводности на основании закона Фурье. Полученные результаты для температуры 300 К и различных комбинаций размера кремниевого образца и граничных условий представлены в таблице.

**Рассчитанные значения коэффициента теплопроводности**

| Потенциал | Размер образца, элементарных ячеек | Граничные условия по $x, y, z$ | Описание образца | Коэффициент теплопроводности, Вт/м·К |
|-----------|------------------------------------|--------------------------------|------------------|--------------------------------------|
| Tersoff   | 14x8x8                             | СПП                            | нанослой         | 15.6                                 |
| Tersoff   | 28x8x8                             | СПП                            | нанослой         | 39.2                                 |
| SW        | 14x4x4                             | ССС                            | нанопроволока    | 4.7                                  |
| SW        | 20x4x4                             | ППП                            | кристалл         | 6.2                                  |

Таким образом, расчеты для случая тонкого слоя кремния (7.6 нм и 15.2 нм, соответственно) показывают рост коэффициента теплопроводности в зависимости от толщины слоя. При этом полученные значения существенно меньше, чем экспериментально измеренные в сплошном кремнии. Результат для нанопроволоки (образец со свободными по всем направлениям граничными условиями) сопоставим с результатом работы [2], где время релаксации при формировании температурного градиента было значительно больше и получено значение коэффициента теплопроводности порядка 1 Вт/м·К. И, наконец, полученное значение коэффициента для образца с периодическими по всем направлениям граничными условиями соответствует результату 5 Вт/м·К из работы [3], где время релаксации также было значительно больше.

Дополнительно следует отметить, что в данной работе для расчетов использовались пакеты молекулярной динамики XMD [4] и LAMMPS [5]. Опыт использования пакета XMD показал, что на основе управляющих входных команд модельный образец можно разбить на несколько блоков вдоль направления  $x$  и измерять температуру в каждом из них. Далее, модификация процедуры расчета траекторий частиц позволяет задать входящий и выходящий тепловые потоки. Если проводить моделирование достаточно долго (и на первой стадии – достижение равновесия при заданной

температуре, и на второй – формирование температурного градиента) и правильно выбрать размеры образца, получается разумная оценка коэффициента теплопроводности как в случае периодических условий по  $x$ , так и в случае свободных границ. Однако в пакете XMD параллельное выполнение поддерживается только для вычисления ЕАМ-потенциалов, предназначенных для металлов, в то время как для данной задачи и многих других, актуальных при моделировании в физике полупроводников, обычно используется потенциал, предназначенный для ковалентных материалов.

С другой стороны, пакет LAMMPS позволяет во всех случаях использовать ускорение расчетов за счет параллельного выполнения на многопроцессорных системах. Более того, управляющие команды позволяют задать входящий и выходящий тепловые потоки (без модификации кода). Однако выбрать параметры моделирования так, чтобы получить температурный градиент и не разрушить при этом динамику системы, очень сложно. Таким образом, при наличии опыта удачного использования названных опций, пакет LAMMPS является более эффективным.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь, ГПНИ «Информатика и космос».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Termentzidis, K. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of the in-plane thermal conductivity of superlattices with rough interfaces / K. Termentzidis, P. Chantrenne, P. Keblinski // *Physical Review*. 2009. Vol.79B. P.214307.
2. Yang, X. Anomalous heat conduction behavior in thin finite-size silicon nanowires / X. Yang, A. To, R. Tian // *Nanotechnology*. 2010. Vol.21. P.155704.
3. Srinivasan, S. On parallel NEMD simulations of heat conduction in heterogeneous materials with three-body potentials: Si/Ge superlattice / S. Srinivasan, R.S. Miller // *Numerical Heat Transfer*. 2007. Vol. B52. P. 2971998.
4. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. – March, 2010. – Mode of access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>. – Date of access: 01.05.2012.
5. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator // [Electronic resource]. – January, 2009. – Mode of access: <http://lammps.sandia.gov/>. – Date of access: 01.05.2012.