

Теплопроводность тонких кремниевых эллиптических наноструктур

Н.В. Масальский¹

¹ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия, volkov@niisi.ras.ru

Аннотация. Обсуждается поведение аномальной теплопроводности кремниевых цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением в стационарных состояниях. При помощи численного моделирования показано, что аномальная теплопроводность связана с формой поперечного сечения. Чем меньше отношение меньшей полуоси эллипса к большей, тем выше теплопроводность эллиптических наноструктур. А также при повышении температуры вклад в аномальную теплопроводность из-за снижения числа Кнудсена превалирует над вкладом из-за снижения объемной теплопроводности. Поэтому, с ростом температуры наблюдается рост теплопроводности цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением. Полученные результаты демонстрируют аномальную природу теплопроводности тонких кремниевых цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением, которая отличается от классических представлений о теплопроводности твердых тел. аннотации.

Ключевые слова: теплопроводность, число Кнудсена, уравнение Максвелла-Каттанео-Вернотта, кремниевые наноструктуры

1. Введение

Аномальная природа тепловых процессов в низко размерных структурах связана с влиянием отношения между «средним свободным пробегом» теплоносителей (l_{ph}) и соответствующим характерным размером низко-размерной системы [1]. Опираясь на обширные исследования, можно прогнозировать, что теплопроводность нанопровода зависит от множества факторов, таких как материал, размер поперечного сечения, формы и технологии изготовления [2-5]. В настоящей работе мы исследуем случай, при котором поперечное сечение нанопроволоки отличное от круглого, является эллиптическим, что обусловлено параметрическим разбросом параметров техпроцесса [6].

Цель работы – с помощью фоновой гидродинамики численно исследовать аномальную теплопроводность кремниевых цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением в стационарных состояниях. При этом тепловые характеристики материала учитываются посредством его объемной теплопроводности.

2. Моделирование теплопроводности в стационарном состоянии

В модельном представлении поперечное сечение нанопроволоки есть эллипс где $2a$ – большая ось и $2b$ – малая ось (см. рис. 1), длина нанопроволоки L значительно больше $2a$, и направление теплового потока совпадает с положительным направлением оси z . В приближении, что

отношение между характеристическим размером системы и средним свободным пробегом (т. е. число Кнудсена Kn) всегда больше единицы ($Kn > 1$), то теплоносители переходят в гидродинамический режим [4, 5]. Следует отметить, что приложениях найти характерный размер системы не так просто, как может показаться [7]. Неправильный выбор этого параметра (точнее его численное значение) может привести к неверным результатам [8]. Здесь мы предполагаем, что $Kn = l_{ph}/b$ потому что преобладающими столкновениями фононов со стенками будут те, которые соответствуют меньшему размеру. В этом случае решение общего уравнения Максвелла-Каттанео-Вернотта (МКВ) [9] для объемного теплового потока (т. е. для пропадающего теплового потока у стенок) имеет вид [10, 11]

$$q_v(x,y) = \frac{k(T)}{2Kn(T)^2} \left(\frac{1}{1+\gamma^2} \right) \left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} \right) \frac{\Delta T}{L}, \quad (1)$$

где $\gamma = b/a$.

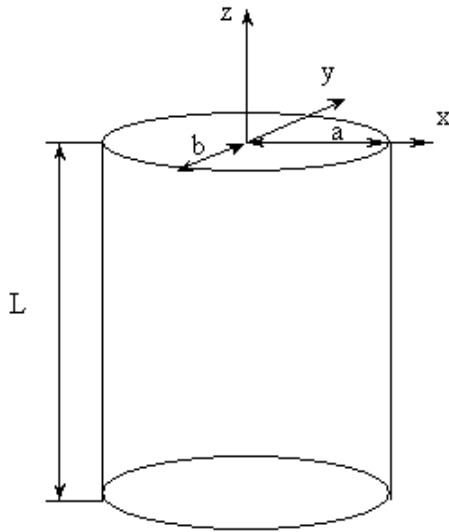


Рис. 1. Нанопроволока с эллиптическим поперечным сечением, где a – большая полуось (совпадает с осью x), b – малая полуось (совпадает с осью y), L – длина нанопроволоки, ось z – направление распространения теплового потока

Из (1), легко получить, что вклад теплового потока на границе в виде:

$$q_b(x) = \frac{k(T)}{Kn(T)} \left(\frac{C}{1+\gamma^2} \right) \sqrt{\frac{x^2}{a^2}(\gamma^2-1)+1} \frac{\Delta T}{L}, \quad (2)$$

Следует отметить, что, даже при $l_{ph} \gg b$, поток q_b нельзя рассматривать как постоянную величину по всему поперечному сечению, поскольку нормальная производная не всегда имеет одинаковое значение вдоль эллиптической границы.

Уравнения (1) и (2) позволяют получить следующее выражение для аномальной теплопроводности [11]:

$$k_e(Kn) = \frac{\int_{-b}^b dy \int_{-\sqrt{1-y^2/b^2}}^{\sqrt{1-y^2/b^2}} dx [q_v(x, y) + q_b(x)]}{\pi ab \left(\frac{\Delta T}{L} \right)} =$$

$$= \frac{k(T)}{4Kn(T)} \left(\frac{1}{Kn(T)} \left(\frac{1}{1+\gamma^2} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{C}{2} \left(1 - 0.6976 \left(\frac{\gamma^2-1}{1.915\gamma^2+1} \right) \right) \right) \quad (3)$$

Выражение (3) позволяет исследовать поведение теплопроводности цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением в зависимости от топологических параметров и температуры, не прибегая к сложным вычислениям.

3. Результаты моделирования

Ниже на рис. 2 приведены результаты численного моделирования аномальной теплопроводности в эллиптических кремниевых нанопроводах, которые получены из (3). Модельное поведение исследовано относительно параметров Kn и γ .

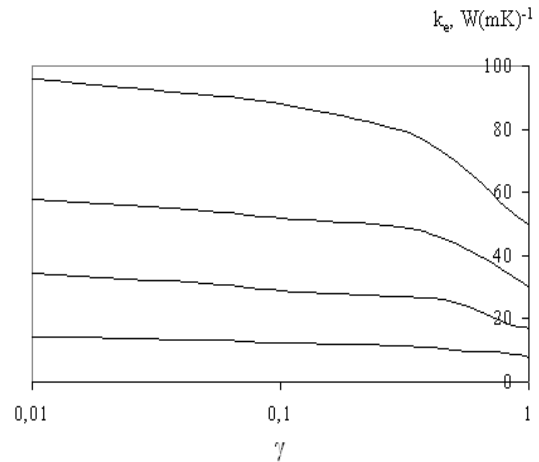


Рис. 2. Зависимость k_e от γ при разных Kn , где $Kn=2$ – верхняя кривая, ниже $Kn = 3, 5$ и 10 . Значения γ представлены в логарифмическом масштабе. ось y (совпадает с осью y), L – длина нанопроволоки, ось z – направление распространения теплового потока

Из результатов, приведенных на рис. 2 следует, что аномальная теплопроводность связана с формой поперечного сечения. В частности, теоретическая модель показывает, что чем меньше γ , тем выше теплопроводность эллиптических наноструктур. Следует отметить, что примерно в диапазоне γ от 1 до 0.2 эта зависимость степенная, а при меньших значениях γ она становится практически линейной для любого Kn , т.е. когда нанотрубка становится более похожей на пленку.

Мы отметили два предельных случая $\gamma = 1$ круглого сечения и $\gamma = 0,01$ сильно сплюсненного эллипса. Результаты расчетов приведены на рис. 3.

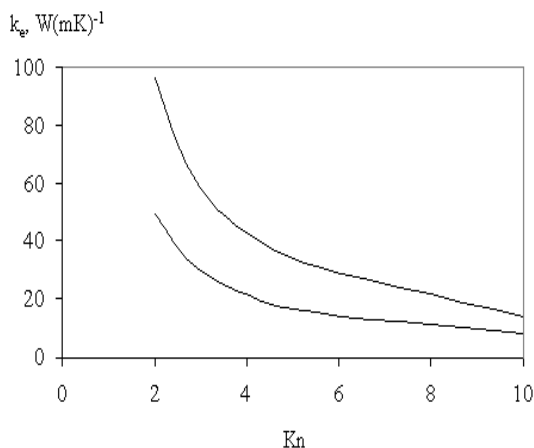


Рис. 3. Зависимость k_e от Kn для $\gamma = 0, 01$ (верхняя кривая) и $\gamma = 1$ (нижняя кривая)

Отметим, что для любого Kn отношение

$$\frac{k_e(\gamma = 0.01)}{k_e(\gamma = 1)} \approx 2$$

Сопоставим значения теплопроводности эллиптических волокон и пленок с идеальным прямоугольным сечением. При условии $W \gg h$, где W, h - ширина и высота пленки, соответственно, то можно получить следующее выражение для аномальной теплопроводности. Пренебрегая членами, содержащими масштабирующий коэффициент второго порядка и выше, решения МКВ сводится к [10, 11]:

$$k_1(Kn) = \frac{k(T)}{Kn(T)} \frac{1}{12Kn(T)} (1 - 0.63\chi + 6CKn(T)(1 - 0.271\chi)) \quad (4)$$

В [11] утверждается, что приближенное решение (4) практически не отличается от точного. Тогда, для $\gamma = \chi = 0, 01$ значение k_e превышает k_1 на 3.5% для $b=h=10$ нм, при $\gamma = \chi = 0, 1$ отличие составляет 9.6%. Поэтому значение аномальной теплопроводности эллиптических наноструктур может служить первоначальным приближением для оценки теплопроводности неидеальной прямоугольной пленки.

Исследование температурной зависимости теплопроводности представлено на ниже рис. 4 и 5. Хорошо известно, что с повышением температуры объемная теплопроводность кремния снижается. Аналогичным образом ведет себя и число Кнудсена. Данная зависимость в диапазоне температур 200...400 К представлена на рис. 4.

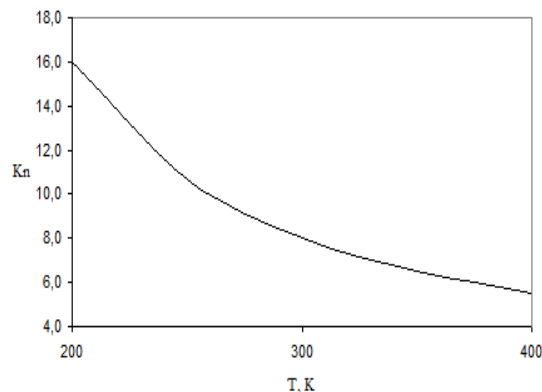


Рис. 4. Зависимость Kn от T для $b=10$ нм

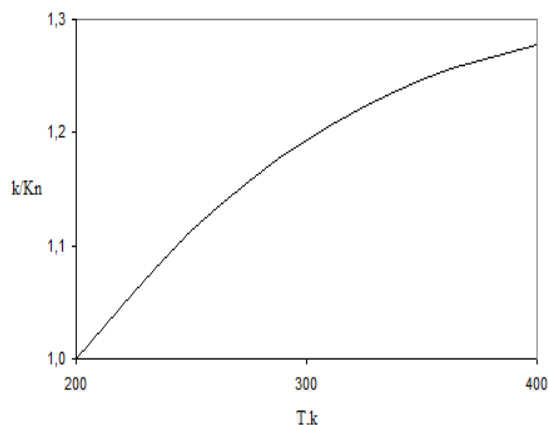


Рис. 5. Зависимость k/Kn от T

Переход к другим размерам можно реализовать умножив значение Kn при выбранной температуре на отношение т.е. $Kn = 0.1b_c Kn(b = 10)$

Сопоставив два выражения (3) и (4), можно сделать вывод, что они включают отношение $k(T) / Kn(T)$, которое существенным образом определяет температурную зависимость теплопроводности и пленок и нитей. Выше было отмечено, что, во-первых, с уменьшением Kn теплопроводность возрастает, и, во-вторых, с ростом температуры объемная теплопроводность падает. В результате с повышением температуры задействованы два взаимно подавляющих механизма. Этот процесс можно интерпретировать в виде отношения $k(T) / Kn(T)$. На рис 5 представлена температурная зависимость данного отношения. Поскольку сравниваемые величины имеют разные размерности, мы первоначально их нормируем относительно значений при $T=200$ К. Затем нормированные значения используем для вычисления соотношения $k(T) / Kn(T)$. Из результатов расчетов видно, что вклад в аномальную теплопроводность из-за снижения Kn превалирует над вкладом из-за

снижением k . И, следовательно, с ростом температуры наблюдается рост теплопроводности цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением. Примерно на 28% в диапазоне от 200 до 400 К.

4. Заключение

На основе фоновой гидродинамики с использованием уравнения Максвелла-Каттанео-Вернотта численно исследовано поведение аномальной теплопроводности кремниевых цилиндрических эллиптических наноструктур с эллиптическим сечением в стационарных состояниях. Показано, что аномальная теплопроводность связана с формой поперечного сечения. Чем меньше отношение меньшей полуоси эллипса к большей, тем выше теплопроводность эллиптических наноструктур. При этом в диапазоне отношений от 1 до 0.2 эта зависимость степенная, а при меньших значениях она становится практически линейной для любого числа Кнудсена, т.е. когда наноструктура становится

более похожей на пленку.

Исследована температурная зависимость аномальной теплопроводности. Показано, что при повышении температуры вклад в аномальную теплопроводность из-за снижения числа Кнудсена превалирует над вкладом из-за снижения объемной теплопроводности. Следовательно, с ростом температуры наблюдается рост теплопроводности цилиндрических наноструктур с эллиптическим сечением на 28% в диапазоне от 200 до 400 К.

Публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН «Проведение фундаментальных научных исследований (47 ГП)» по теме № FNEF-2022-0022 "Математическое обеспечение и инструментальные средства для моделирования, проектирования и разработки элементов сложных технических систем, программных комплексов и телекоммуникационных сетей в различных проблемно-ориентированных областях".

Thermal Conductivity of Thin Silicon Elliptical Nanostructures

N. Masalsky

Abstract. The behavior of anomalous thermal conductivity of silicon cylindrical elliptical nanostructures with elliptical cross-section in stationary states is discussed. Numerical simulation has shown that the abnormal thermal conductivity is related to the shape of the cross-section. The smaller the ratio of the large semi-axis of the ellipse to the smaller one, the higher the thermal conductivity of elliptical nanostructures. And that with an increase in temperature, the contribution to abnormal thermal conductivity due to a decrease in the Knudsen number prevails over the contribution due to a decrease in volumetric thermal conductivity. Therefore, with an increase in temperature, the thermal conductivity of cylindrical nanostructures with an elliptical cross-section increases by 28% in the range from 200 to 400 K. The obtained results demonstrate the anomalous nature of the thermal conductivity of thin silicon cylindrical nanostructures with an elliptical cross-section, which distinguishes them from the classical ideas about the thermal conductivity of solids.

Keywords: thermal conductivity, Knudsen number, Maxwell-Cattaneo-Vernott equation, silicon nanostructures

Литература

1. J.H. Davies. The physics of low dimensional semiconductors. New York, Plenum, 1998.
2. R. Luzzi, A.R. Vasconcellos, J. Galvão Ramos. Predictive statistical mechanics: A non equilibrium ensemble formalism. Fundamental theories of physics. Dordrecht, Kluwer, 2002.
3. W. Liu, M. Asheghi. Phonon-boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers. "Appl. Phys. Lett.", V 84, (2004), 3819–3821.
4. Z.M. Zhang. Nano/Microscale heat transfer. New York, McGraw-Hill, 2007.
5. D. Jou, J. Casas-Vázquez, G. Lebon. Extended irreversible thermodynamics, 4th revised edn. Berlin, Springer, 2010.
6. F. Schwierz, H. Wong, J. J. Liou. Nanometer CMOS. Singapore, Pan Stanford Publishing, 2010.
7. A. Sellitto, V. Cimmelli, D. Jou. Mesoscopic theories of heat transport in nanosystems. Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, Springer International Publishing Switzerland, 2016.
8. Н.В. Масальский. Аномальная теплопроводность в кремниевых цилиндрических наноструктурах. "Труды НИИСИ", Т 10, (2020), 45-51.

9. C. Cattaneo. Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée. "C. R. Acad. Sc.", V. 247, (1958), 431–433.
10. F.X. Alvarez, V.A. Cimmelli, D. Jou, A. Sellitto. Mesoscopic description of boundary effects in nanoscale heat transport. "Nanoscale Systems MMTA", V. 1, (2012), 112–142.
11. A. Sellitto, F.X. Alvarez, D. Jou. Geometrical dependence of thermal conductivity in elliptical and rectangular nanowires. "Int. J. Heat Mass Transfer", V. 55, (2012), 3114–3120.