

Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОДАЛЬНОГО ПОДАВЛЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЁТА ЭФФЕКТИВНОГО
КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СВЕРХРЕШЕТОК

Абгарян К.К., Колбин И.С.
ФИЦ ИУ РАН

Моделирование тепловых процессов в наноструктурах, в частности сверхрешетках, представляет актуальную научно-техническую задачу, связанную со значительным увеличением выделяемого тепла при росте рабочих частот и уменьшением размеров устройств, которые используют подобные материалы [1,2]. Одним из важных параметров для подобных задач является эффективный коэффициент теплопроводности, который может быть выражен через функцию модального подавления S [3, 4]:

$$\kappa(L) = \sum_{\lambda} S_{\lambda} C_{\lambda} \|\mathbf{v}_{\lambda}\| \Lambda_{\lambda} \cos^2(\theta_{\lambda})$$

где L – размер образца, λ – индекс включающий индекс моды и волновой вектор, C – удельная теплоемкость, \mathbf{v} – групповые скорости фононов, θ – угол между групповой скоростью и направлением теплопереноса. Для поперечного теплопереноса:

$$S_{\lambda} = \frac{1}{1 + 2K_{\lambda}}$$

где K – число Кнудсена, Λ – длины свободных пробегов фононов, τ^0 – время релаксации, учитываются двухфононные (a, b) и трехфононные ($3ph+-$) взаимодействия:

$$K_{\lambda} = \frac{\Lambda_{\lambda} |\cos\theta_{\lambda}|}{L}$$

$$\Lambda_{\lambda} = \|\mathbf{v}_{\lambda}\| \tau_{\lambda}^0$$

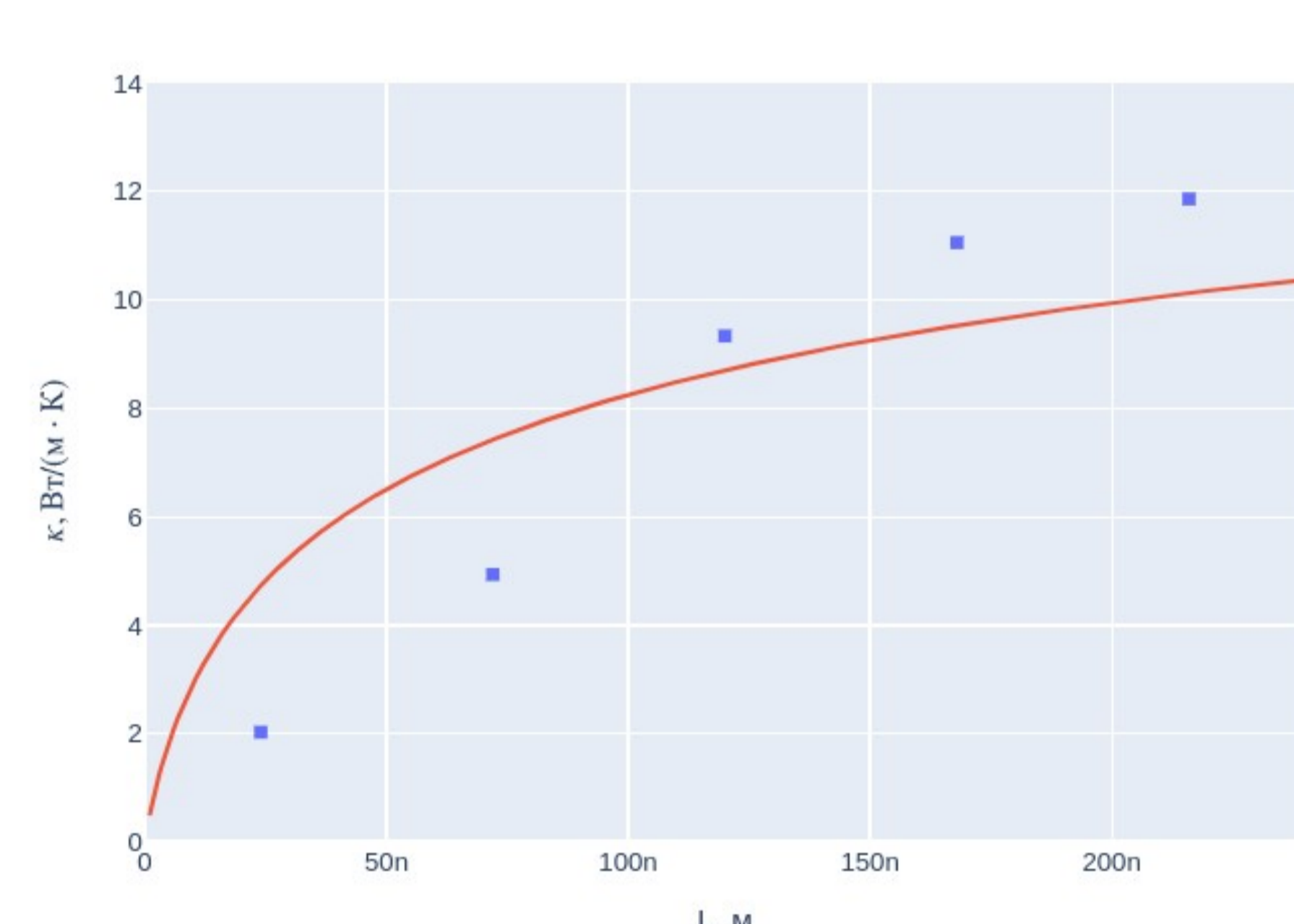
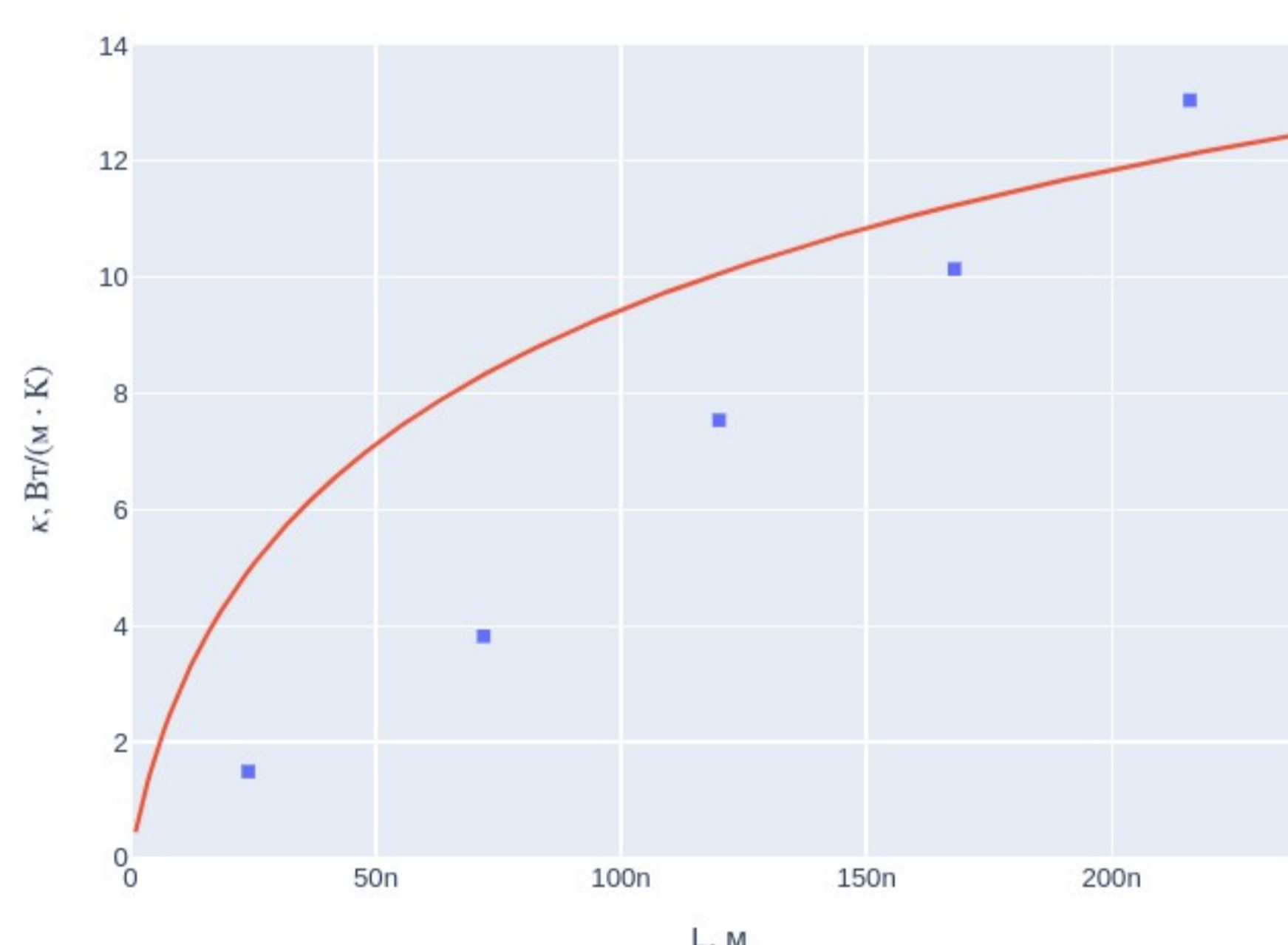
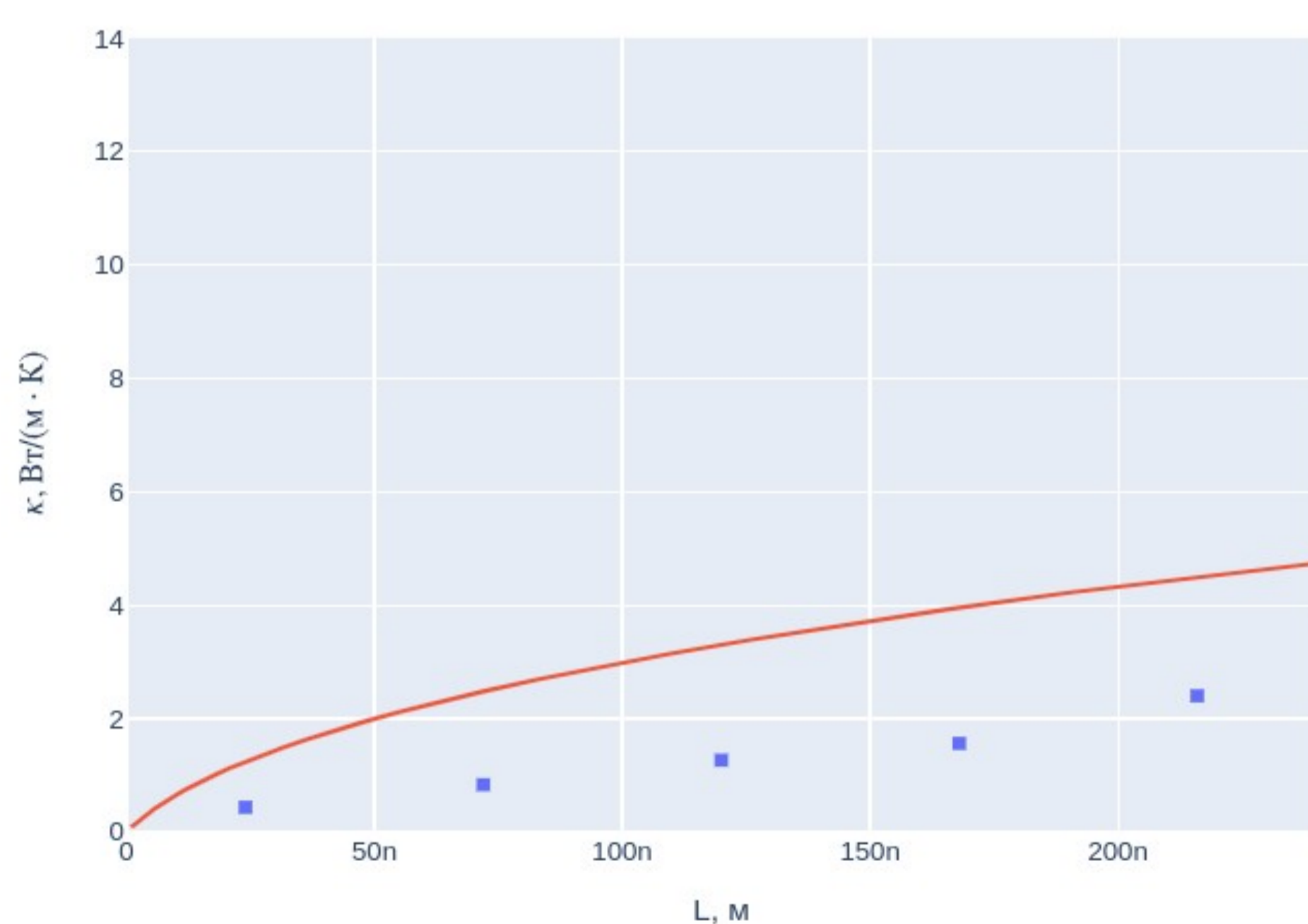
$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^0} = \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph+}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph-}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^a} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^b}$$

Результаты расчетов (сплошная красная), сравнение с экспериментом (точки, [5]) для разных температур:

T = 30 K

T = 150 K

T = 296 K



Литература

1. J. Carrete, B. Vermeersch, A. Katre, et al. almaBTE: a solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials. Comp. Phys. Commun. 220C, 351 (2017).
2. В.И. Хвесюк, А.С. Скрябин. Теплопроводность наноструктур. Теплофизика высоких температур, том 55, н. 3, с.446-471 (2017).
3. J. Carrete, B. Vermeersch, Natalio Mingo. Cross-plane heat conduction in thin films with ab-initio phonon dispersions and scattering rates. Applied Physics Letters, 108(19) (2016).
4. К.К. Abgaryan, I.S. Kolbin. Ab initio calculation of the effective thermal conductivity coefficient of a superlattice using the Boltzman transport equation. Russian Microelectronics, T.49, N. 8, pp594-599, (2020).
5. M.N. Luckyanova, J. Garg, K. Esfajani et al. Coherent Phonon Heat Conduction in Superlattices. Science 338(6109):936-9 (2012).