

Анализ границ применимости различных моделей для расчета теплофизических свойств тонких плёнок

Чикин М.И., Баринов А.А.

МГТУ им. Н. Э. Баумана

АННОТАЦИЯ

В работе проводится систематизация и сравнительный анализ наиболее широко распространенных моделей и подходов для расчета теплоёмкости тонких пленок. В качестве примера рассмотрены пленки кремния толщиной порядка десятков нанометров и диапазоне температур от 10K до 600K.

Объект исследования – тонкие плёнки толщиной порядка десятков нанометров с ненагруженными границами (свободными от усилий и закреплений).

Предмет исследования – гармонические свойства (дисперсионные соотношения, групповые, фазовые скорости фононов и функция плотности состояний), теплоёмкость и показатель степени теплоёмкости.

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ РАСЧЕТНЫХ МОДЕЛЕЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ

Проведена систематизация моделей расчета теплоемкости тонких пленок по двум ключевым признакам (см. рис. 1):

- модель дисперсии (включая учет квантово-размерного эффекта)
- метод учета суммирования по спектру состояний (включая учет размерного эффекта).

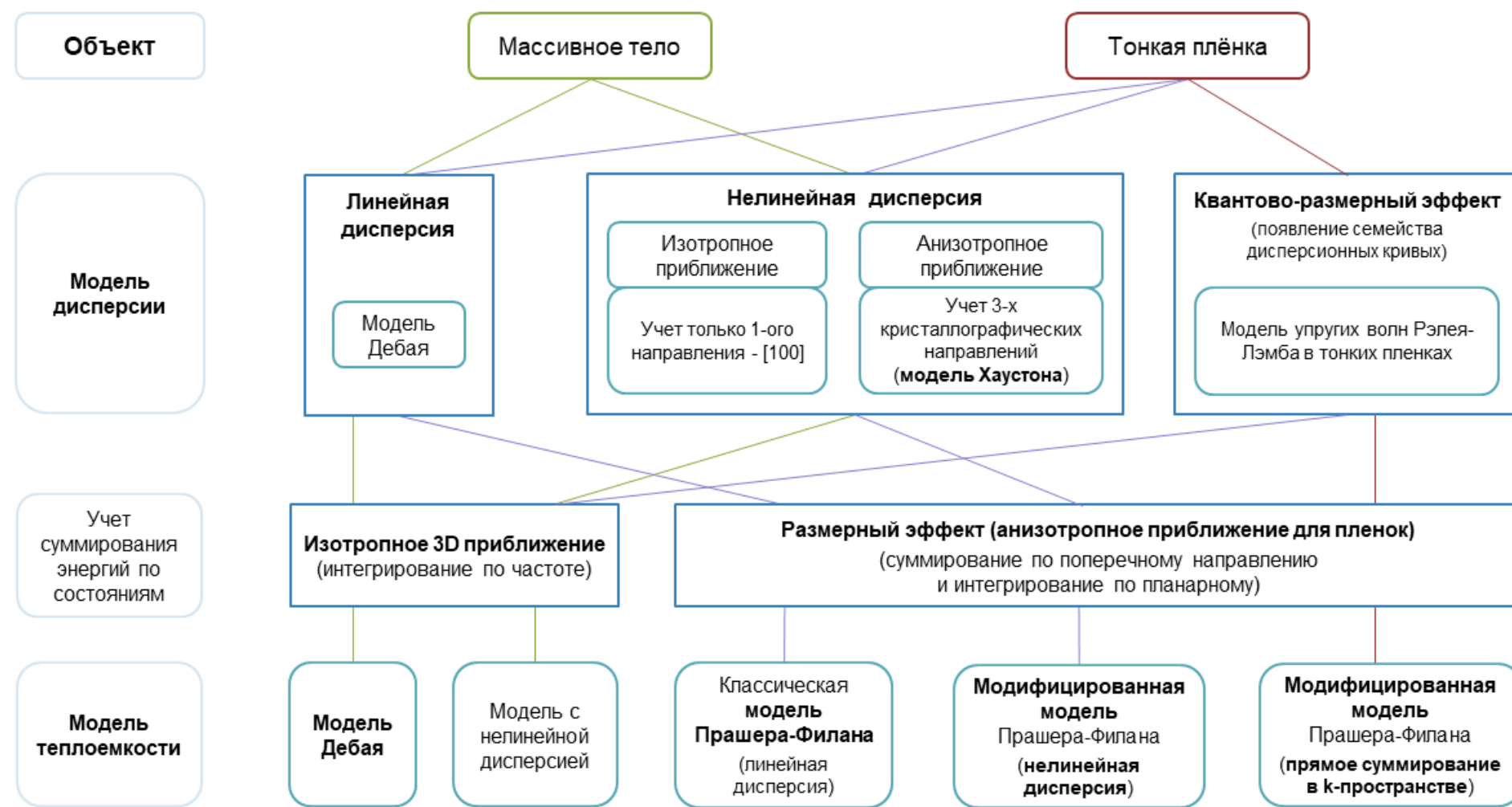


Рис. 1. Схема (иерархия) моделей расчета теплоемкости.

МОДЕЛИ РАСЧЕТА ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ

Рассмотрен ряд моделей (рис. 2), отличающийся дисперсией и методикой суммирования состояний фононов в пленке. За основу взяты: классическая модель Прашера-Филана [1] и две её модификации, модель Дебая и модель, учитывающая осреднение скоростей фононов по частоте с помощью функции плотности состояний DOS [2]. В качестве дисперсии для плёнки использовалась модель упругих волн Рэлея-Лэмба, а в массивном теле – изотропное [3] и анизотропное [4,5] приближения.

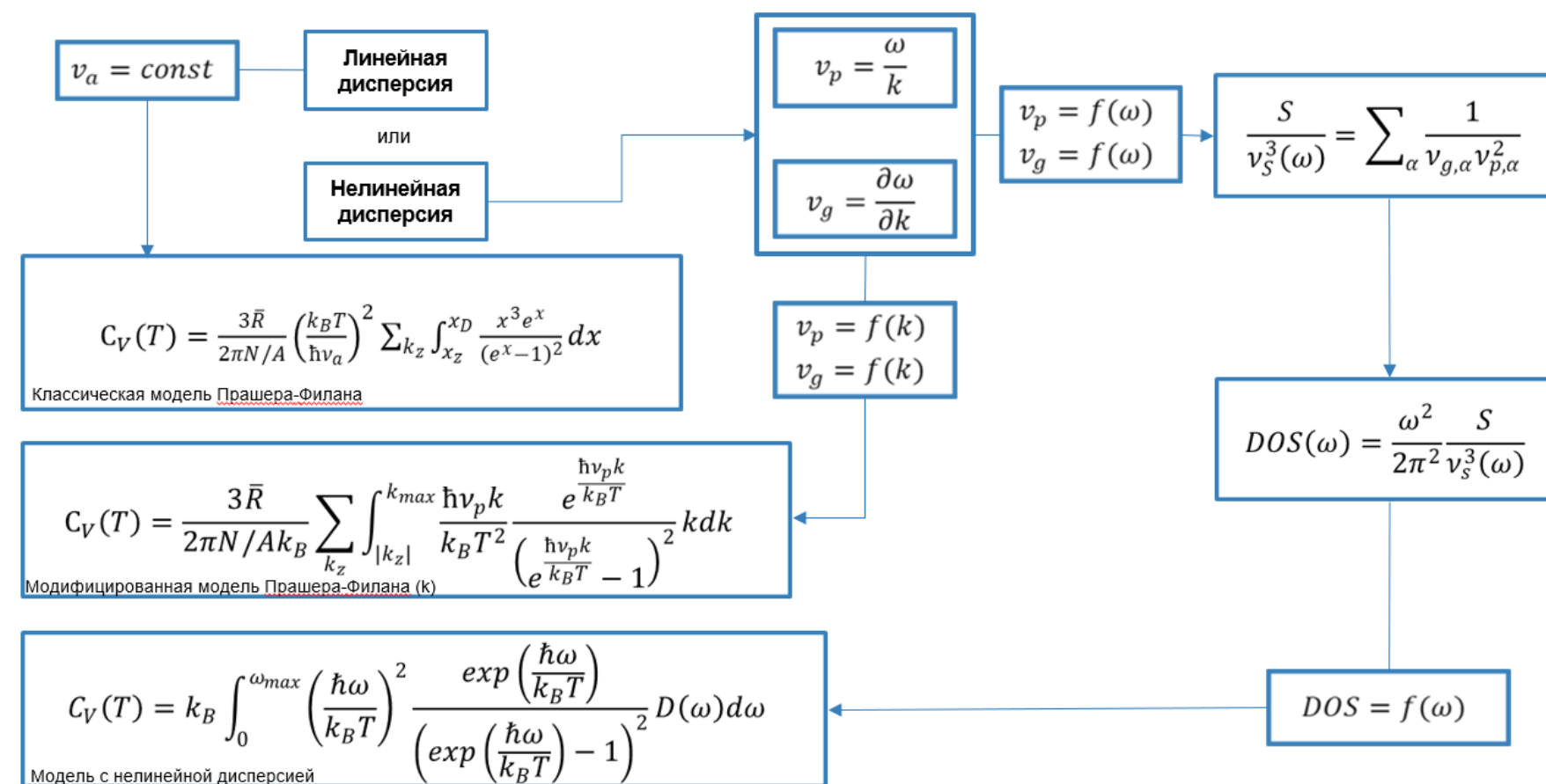


Рис. 2. Блок-схема расчета теплоемкости.

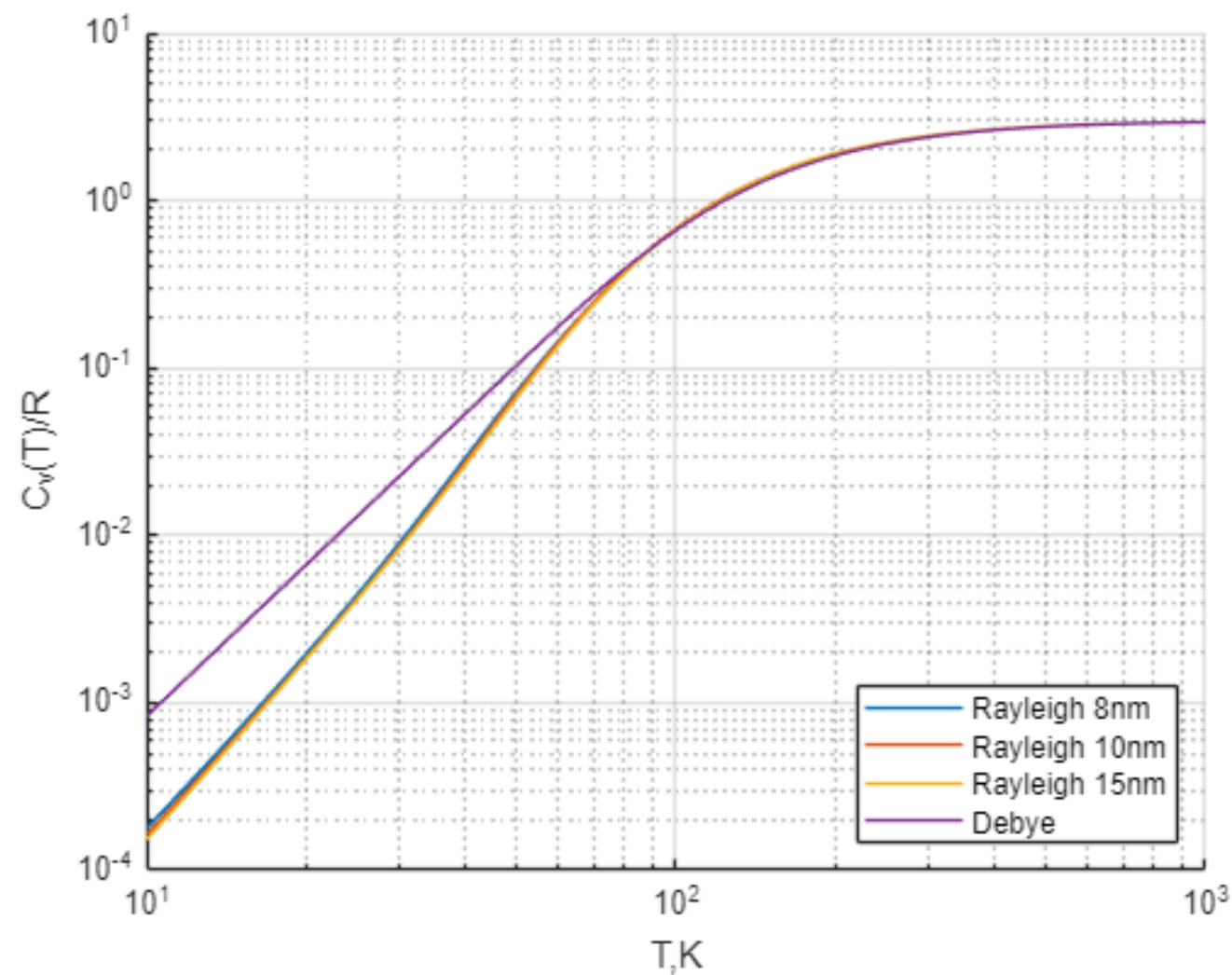


Рис. 3. Теплоемкость пленок кремния с учетом нелинейной дисперсии (Рэлея-Лэмба) в зависимости от температуры.

ВЛИЯНИЕ МОДЕЛИ ДИСПЕРСИИ НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Расчет теплоемкости в изотропном 3D приближении [6] при учете лишь квантово-размерного эффекта (нелинейная дисперсия на примере волн Рэлея-Лэмба) показал отсутствие влияния толщины пленки на теплоемкость (рис. 3), что соответствует нивелированию квантово-размерного эффекта при температурах выше 10K. Это связано с тем, что определяющее влияние на результат оказывает именно применение изотропной модели, справедливой лишь для массивного образца. Однако, для структур низкой размерности применение таких моделей приводит к ошибочным выводам.

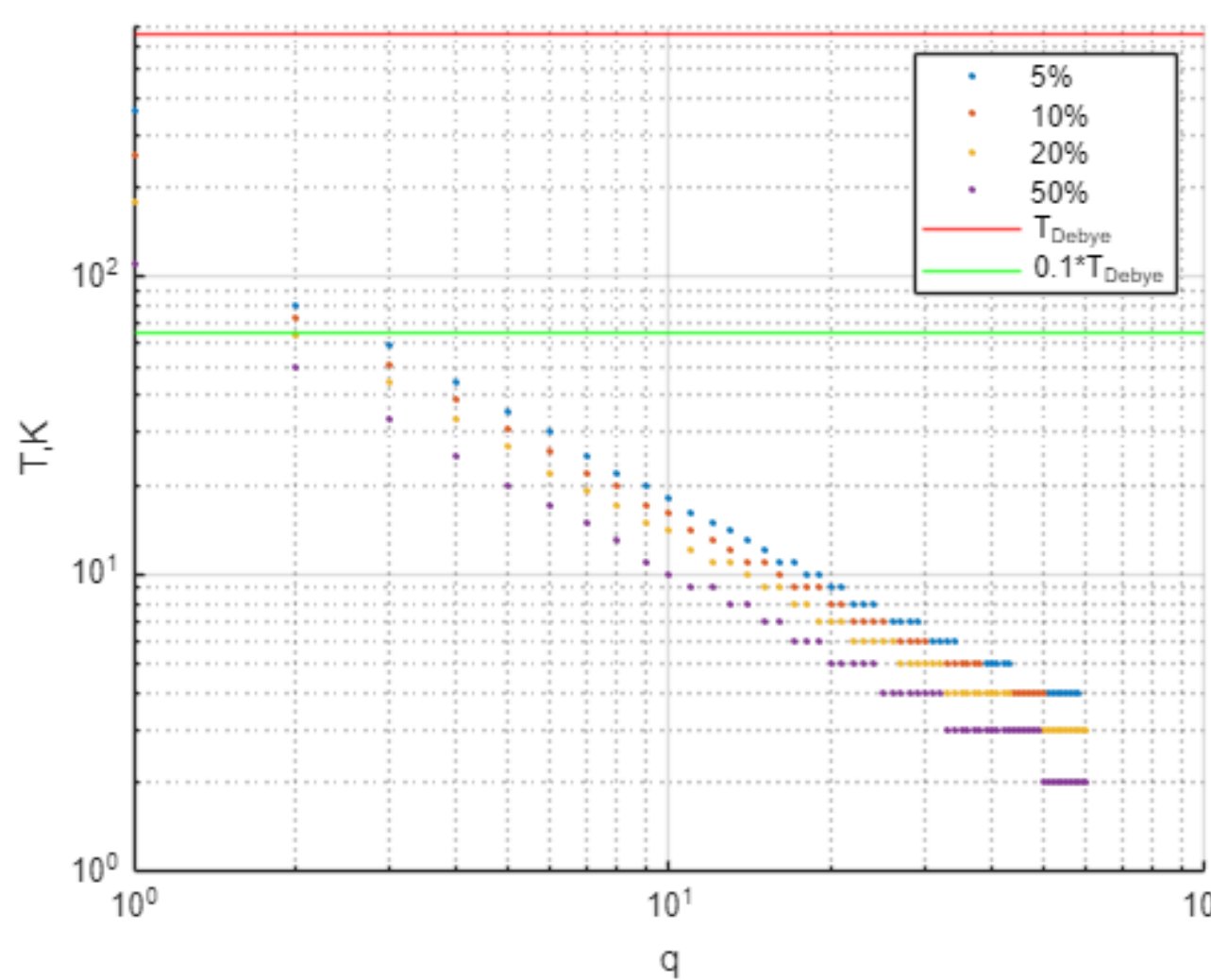


Рис. 4. Теплоемкость пленок кремния толщиной q-слоев с учетом размерного эффекта в долях от теплоемкости массивного образца для различных температур.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Определена область влияния размерного эффекта на теплоёмкость пленки (рис. 4), где каждая точка соответствует доли (в %) от теплоемкости макроскопического образца в зависимости от температуры и толщины слоев пленки.

Результаты расчета теплоемкость пленок с учетом классического размерного эффекта (Прашера-Филана [1]) и линейной дисперсии показали, что влияние размера существенно лишь при температурах во много ниже температуры Дебая и увеличивается с уменьшением размера пленок. Так при толщине пленки кремния в 3 слоя теплоемкость неотличима от макроскопического образца при 40 K и выше, а при толщинах в 10 слоев – при 20 K и выше, 30 слоев – 5K.

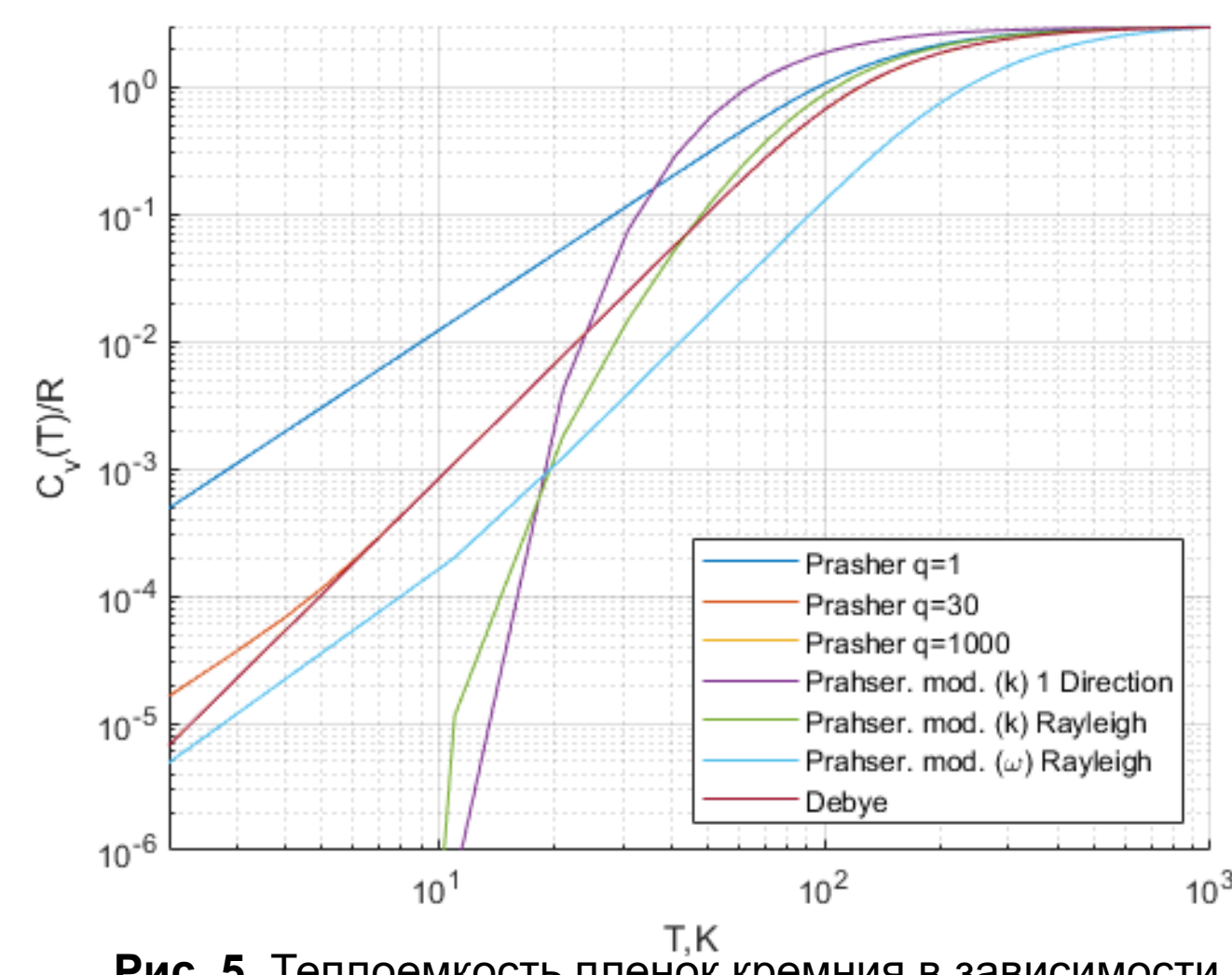


Рис. 5. Теплоемкость пленок кремния в зависимости от температуры по различным расчетным моделям.

СОВМЕСТНОЕ ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА И ДИСПЕРСИИ НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Использование одновременно нелинейных моделей дисперсии и размерного эффекта при расчете теплоемкости пленок (рис. 5) приводит к тому, что размер структуры влияет на теплоемкость и при существенно больших температурах, чем модель с линейной дисперсией.

Так, применение модели Рэлея-Лэмба показывает, что размерный эффект оказывает существенное влияние на теплоемкость пленки толщиной в 30 слоев вплоть до 50 K. Однако, применение для тонкой пленки нелинейной дисперсии макроскопического образца показывает расхождение с теплоемкостью Дебая и при существенно больших температурах вплоть до 200K.

Более того, применение методики интегрирования по частоте с использованием функции плотности состояний [2] (DOS по методу Хаустона или DFT) показывает существенное расхождение с другими моделями, что связано со сложностью учета разрешенных состояний при использовании DOS. Таким образом наблюдается существенное влияние дисперсии на теплоемкость пленки.

ВЫВОДЫ

Установлено, что определяющее влияние на теплоемкость тонких пленок толщиной порядка десятков нанометров в диапазоне температур от 10 K до 600 K на примере кремния оказывает именно выбор модели дисперсионных соотношений (квантово-размерный эффект) при одновременном учете размерного эффекта. Так при рассмотрении пленок кремния толщиной 30 атомных слоев наблюдается отличие теплоёмкости от макроскопического тела при температурах порядка температуры Дебая. А при независимом учете либо размерного эффекта, либо квантово-размерного эффекта отличие в теплоемкостях проявляется лишь при температурах во много меньше температуры Дебая.

Литература

1. Zhang Z. M., Luby. Nano/microscale heat transfer. Marietta: Springer Nature, 2020. 780 p.
2. Kittel Ch. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. John Wiley & Sons, 2005. 700 p.
3. Баринов А. А. и др. Обновленная модель расчета теплопроводности тонких пленок кремния и германия // Ядерная физика и инжиниринг. 2018. Т. 9. №. 5. С. 433-444.
4. Nilsson G., Nelin G. Study of the homology between silicon and germanium by thermal-neutron spectrometry // Physical Review B. 1972. Vol. 6. № 10. P. 3777.
5. Dolling G. Inelastic scattering of neutrons in solids and liquids // Inelastic scattering of neutrons in solids and liquids: proceedings of a symposium. Viena: I.A.E.A, 1963. P. 41 – 42.
6. Кольский Г. Волны напряжения в твердых телах. 1955. 194 с.