

Лю Бинь

**РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ РАСЧЕТА И ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ИНТЕРФЕЙСОВ И МУЛЬТИИНТЕРФЕЙСНЫХ СТРУКТУР**

Специальность 01.04.14 –

Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

*Лю Бинь*

Москва – 2022 г.

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

**Научный руководитель:** **Хвесьюк Владимир Иванович**

доктор технических наук, профессор, профессор кафедры теплофизики МГТУ им. Н.Э. Баумана

**Официальные оппоненты:** **Абгарян Каринэ Карленовна**

доктор физико-математических наук, доцент, руководитель отдела математического моделирования гетерогенных систем Вычислительного центра им. А.А. Дородницына Российской академии наук Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН

**Меснянкин Сергей Юрьевич**

кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры авиационно-космической теплотехник Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ»

Защита состоится «07» сентября 2022 г. в 16 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.141.08 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, Лефортовская набережная, д. 1, ф-т «Энергомашиностроение» ауд. 202Э.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайте <http://www.bmstu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1, МГТУ им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.141.08.

Автореферат разослан «   » \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.141.08  
кандидат технических наук, доцент



Егоров К.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** С развитием микро/наноэлектромеханических систем, термоэлектрических материалов, квантовых структур и компонентов (нитевидные нанокристаллы, сверхрешётки и т.д.), миниатюризация оборудования стала тенденцией будущего развития. В то же время возникло принципиально новое направление теплофизики – нанотеплофизика, или теплофизика наноструктур. В рамках этого направления одной из наиболее актуальных задач является разработка теплофизических проблем, связанных с созданием наноэлектроники. Особенность этих систем – тепловыделение в элементах электронных цепей. Уменьшение размеров этих элементов ведёт к резкому росту удельного тепловыделения в них, одновременно к снижению теплопроводности, и, в связи с этим, увеличению рабочих температур, что ухудшает характеристики полупроводников.

В наноэлектронике наибольшие тепловые сопротивления, как правило, возникают в контактах между элементами электрических цепей. С этим связана актуальность данной работы, включающей анализ и развитие теории переноса тепла через контакты твёрдых тел. Это проблема, которая появилась в связи с развитием нанотехнологий. Следует подчеркнуть, что в работе анализируется, как обычный некогерентный перенос тепла через интерфейсы, так и недавно обнаруженный когерентный перенос тепла, характерный только для наноструктур.

Эффективность теплопередачи через интерфейс двух твердых тел обычно описывается проводимостью Капицы (ПК)  $h_K$ , которая определяется как отношение разности теплового потока на единицу площади интерфейса к разности температур с обеих сторон интерфейса. Первая физическая версия процессов переноса энергии через интерфейс между двумя различными материалами принадлежит И.М. Халатникову: это результат рассеяния и преломления упругих волн при пересечении интерфейса. Позднее она получила название модели акустического несоответствия (АММ). К моменту начала работы автора над той моделью общепризнанным было мнение, что АММ правильно предсказывает значения ПК в узкой области температур от 0 до 30 К. Ещё одной версией является модель диффузионного несоответствия, связанная с переносом энергии фононами. Эта модель также не обеспечивает хорошее согласие теоретических результатов и экспериментальных данных. В некоторых случаях эта модель обеспечивает хорошее согласие с экспериментом до 100 К.

В настоящее время существуют различия между предсказанным и экспериментальным значением ПК и необходимо соответствующее понимание рассеяния фононов. Это вызывает необходимость проведения расчетно-теоретических исследований, направленных на изучение рассеяния и теплообмена фононов на интерфейсе, а также определение влияния на нее различных условий интерфейса и фононных волновых эффектов.

**Целью диссертационной работы** являлась разработка расчетно-теоретических моделей ПК на гладких и шероховатых интерфейсах и установление физических моделей анализа теплопередачи в многослойных пленках и структурах сверхрешётки.

Для достижения этой цели в работе были поставлены и решены **следующие задачи:**

1. Разработать и верифицировать физико-математическую модель расчета ПК между твердыми телами на основе теории упругих волн.
2. Выполнить комплекс расчетов и проанализировать влияние преобразования мод, дисперсионного соотношения и частоты отсечки фононов на ПК в широком диапазоне температур.
3. Разработать модель расчета ПК через шероховатые интерфейсы и интерфейсы с промежуточным слоем.
4. Провести комплекс расчетов и выполнить анализ влияния шероховатости интерфейса, промежуточного слоя и волновой природы фононов на интерфейсную теплопередачу.
5. Разработать модель расчета теплового транспорта фононов в многослойной пленке с учётом когерентной и некогерентной теплопередачи фононов.
6. Выполнить комплекс расчетов и определить эффективную теплопроводность сверхрешётки при разной температуре, толщине периода, и числа периодов.

**Научная новизна работы** заключается в том, что в ней:

1. Впервые предложена модель упругих волн для расчета ПК, учитывающая строгие процессы отражения и преломления упругих волн на интерфейсе (включая преобразование мод, полное внутреннее отражение и критическую частоту) и реальную атомную структуру обеих твёрдых тел.
2. Предложенный строгий анализ процессов переноса энергии через интерфейс позволил обнаружить новое явление: наличие критической частоты, выше которой происходит полное внутреннее отражение упругой волны, падающей на интерфейс явление, подобное полному внутреннему отражению при достижении критического угла падения волны на интерфейс.
3. Впервые получена полная физическая картина переноса энергии фононов на интерфейсе (распределение  $\alpha$  по углу падения, частоте и моде). Главный результат – показано, что развитая модель обеспечивает очень хорошее совпадение с экспериментальными данными, по крайней мере, до 300 К.
4. На основе развитой модели впервые поставлена задача и предложен метод расчета ПК для различных шероховатостей интерфейсов, учитывающий статистическое распределение профилей шероховатости интерфейсов.
5. Теоретически подтвержден предыдущий экспериментальный вывод: когда шероховатость интерфейса достигает и превышает наноразмер, ПК значительно снижается.
6. Теория упругих волн далее распространена на мультиинтерфейсные наноструктуры, и предложен метод расчета теплопроводности сверхрешеток.
7. Полученные результаты согласуются с другими экспериментальными работами и наглядно иллюстрируют интерференцию, туннелирование и другие волновые эффекты в сверхрешетке.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечивается – использованием обоснованных адекватных физико-математических моделей;

- применением сертифицированного программного комплекса MATLAB с верификацией и валидацией на наборе задач, используемых для оценки качества разработанных физико-математических моделей, применяемых при расчётах;
- удовлетворительным согласием результатов работы и ее отдельных частей с известными (как численными, так и экспериментальными) данными других авторов.

**Практическая ценность** результатов работы состоит в том, что:

1. Теоретически обоснована важность дисперсионных соотношений и полного процесса отражения и преломления упругих волн на интерфейсе для расчета ПК, и подтверждена возможность модели упругих волн для прогнозирования и описания интерфейсной теплопередачи в широком диапазоне температур.
2. По сравнению с традиционными моделями модель упругих волн дает более глубокие физические представления о процессах переноса энергии через интерфейс. Получены результаты показывают, что зеркальное рассеяние доминирует над переносом низкочастотных волн на интерфейсе. Коэффициенты переноса энергии волн на интерфейсе Al/Si близки к единице ниже 4 ТГц.
3. Введение других интерфейсных факторов, таких как шероховатость, в предложенную модель упругих волн позволяет рассматривать теплообмен на интерфейсе в более сложных условиях, что обеспечивает теоретическую основу для дальнейших исследований.
4. Даны рекомендации по управлению теплопередачей интерфейса. Вставка промежуточного слоя также является распространенным методом контроля интерфейсного теплопереноса, который можно рассчитать и проанализировать с помощью трехслойной модели упругих волн.
5. Модель упругих волн была распространена на многослойные материалы с помощью метода матрицы переноса. Полученные результаты обеспечивают глубокое понимание передачи фононов на интерфейсе и могут служить ориентиром при разработке и проектировании многослойных материалов.

**На защиту выносятся следующие положения диссертации:**

1. Модели и результаты численного исследования и анализа ПК на гладких Al/Si и Al/Алмаз интерфейсах в диапазоне температур от 30 до 300 К.
2. Модели и результаты численного исследования и анализа ПК на Al/SiO<sub>2</sub>/Si и Au/SiO<sub>2</sub>/Si интерфейсах с различной нано-шероховатостью.
3. Модели и результаты численного исследования и анализа эффективной теплопроводности сверхрешётки GaAs/AlAs при различной температуре, толщине периода и количестве периодов.

**Личный вклад автора** состоит в том, что представленные результаты получены автором или при его непосредственном участии. Автором лично разработаны физико-математические модели и выполнены комплексные исследования ПК через различные интерфейсы и эффективной теплопроводности наноматериалов с несколькими интерфейсами.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались, обсуждались и получили положительную оценку на ряде Международных и Российских конференциях:

1. XXI Школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством акад.

- РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и тепломассобмена в энергетических установках» (Санкт-Петербург, 2017 г.).
2. Международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (Москва, 2017 г.).
  3. XV Курчатовская междисциплинарная молодежная научная школа (Москва, 2017 г.).
  4. XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (Москва, 2018 г.).
  5. VII Российская национальная конференция по теплообмену (Москва, 2018 г.).
  6. V международная конференция и молодежная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 2019 г.).
  7. Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных и специалистов «Авиационные двигатели и силовые установки» (Москва, 2019 г.).
  8. Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодых ученых «XXXV Сибирский теплофизический семинар» (Новосибирск, 2019 г.).
  9. Всероссийская научная конференция с международным участием «Семинар вузов по теплофизике и энергетике» (Санкт-Петербург, 2019 г.).
  10. III международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (Москва, 2020 г.).
  11. VI Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» (Севастополь, 2021 г.).
  12. Всероссийская научная конференция «XII Семинар ВУЗов по теплофизике и энергетике» (Сочи, 2021 г.).
  13. III международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (Москва, 2021 г.).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 22 научных работ, из них 3 работы в рецензируемых журналах, рекомендуемых ВАК РФ и 8 работ – из Перечня международных научных изданий, включенных в базу данных Web of Science, Scopus, общий объем 4,97 п.л.

**Структура и объём работы.** Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, общих выводов и заключения и списка литературы из 225 наименований. Объем работы включает 157 страниц, 45 рисунков.

#### **Содержание работы**

**Во Введении** отмечена актуальность работы, сформулированы цели и задачи исследования, кратко изложено содержание глав диссертации, сформулированы положения, определяющие новизну и практическую ценность полученных результатов.

**В Главе 1** рассмотрены существующие и разрабатываемые технологии расчета и измерения ПК между твердыми телами. Показано, что метрологии, основанные на методах «накачка-зонд», таких как TDTR и магнитооптическая термометрия с временным разрешением, уже привели к значительным достижениям и открывают потенциал для дальнейшего прогресса в понимании интерфейсного теплового потока. Наряду с метрологией определения тепловых характеристик способность управлять процессами роста с атомарным разрешением также привела к реализации различных интерфейсов, которые позволили провести критическую оценку и проверку различных теоретических моделей.

Основные достижения в области вычислительных инструментов, таких как моделирование молекулярной динамики и расчеты из первых принципов без использования эмпирических данных, обеспечивают описание динамических процессов, происходящих на интерфейсах наноразмеров. Кроме того, методы атомных функций Грина, моделирование волновых пакетов и расчеты динамики гармонической решетки помогли в дальнейшем понимании интерфейсного переноса.

Однако, поскольку эти методы расчета обычно рассматривают фононы как частицы, волновая природа фононов не учитывается. Кроме того, метод моделирования требует чрезвычайно высоких вычислительных затрат, что приводит к ограниченному объему рассматриваемой выборки. Следовательно, необходимо предложить эффективную модель анализа для объяснения основных физических явлений в процессе теплообмена на интерфейсе. К настоящему времени существует разница между теоретическими моделями и экспериментальным измерением ПК. Это вызывает необходимость проведения расчетно-теоретических исследований, направленных на анализ рассеяния и теплообмена фононов на интерфейсе, а также определение влияния на нее волновых эффектов.

В Главе 2 представлена сформулированная физико-математическая модель и результаты расчётных исследований коэффициента переноса энергии фононов и ПК между твердыми телами на основе теории упругих волн.

Фононы, как основной теплоноситель интерфейса металл-изолятор, распространяются в твердом теле в виде колебаний. В гармоническом приближении динамики решетки низкочастотные колебания представляют собой упругие волны в форме звуковых волн, поэтому фононы можно количественно определить как звуковые волны (Рис. 1).

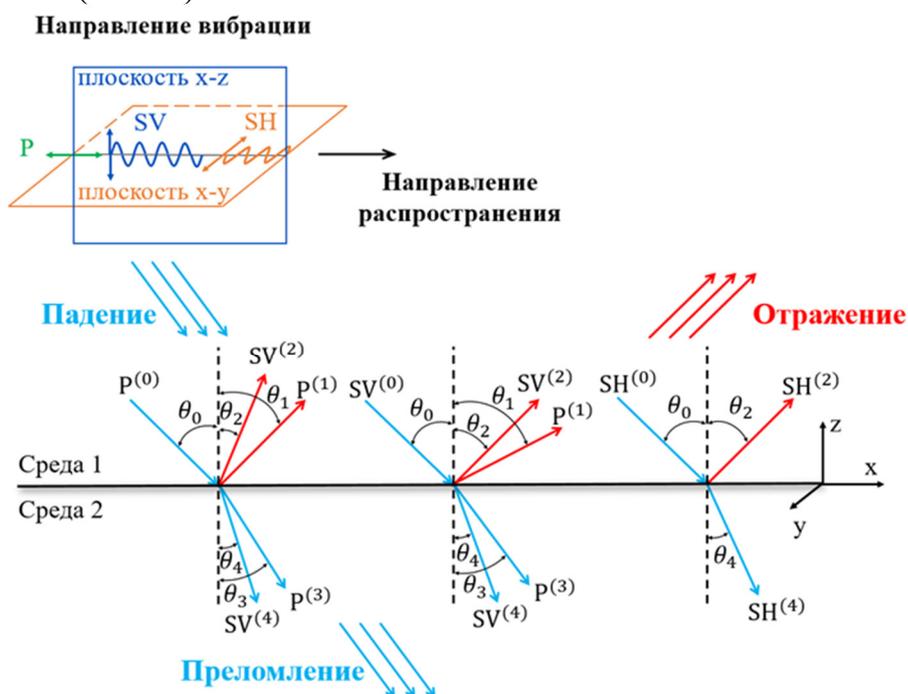


Рис. 1. Отражение и преломление упругих волн на интерфейсе между двумя полубесконечными средами. В изотропных твердых телах существует одна продольная акустическая (LA) мода и две поперечные акустические (TA) моды для  $j$ . В теории упругих волн две волны TA различны и обозначаются SV и SH, а волна P соответствует моде LA

Упругая система падающих и генерируемых волн должна удовлетворять четырем (Р- или SV-волны) или двум (SH-волны) граничным условиям непрерывности напряжений и перемещений на гладкой интерфейсе двух однородных и изотропных полупространств. Исходя из граничных условий, система уравнений неразрывности для генерируемых волновых амплитуд  $A_1, A_2, A_3$  и  $A_4$  определяется как функция угла падения  $\theta_0$ . Углы падающей и генерируемой волн  $\theta_n$  на Рис. 1 удовлетворяют закону Снелла:  $v_0 \sin \theta_n = v_n \sin \theta_0$ ;  $v_T, v_L$  и  $v_T^B, v_L^B$  – фазовые скорости в среде 1 и среде 2 соответственно.

Кроме того, основные колебательные свойства сред жизненно важны как для задач теплопередачи, так и для акустической теории из-за зависящих от частоты движений атомной массы. Дисперсионные соотношения обычно упрощаются до линейной формы с использованием приближения Дебая, которое не учитывает решётчатую атомарную структуру твёрдых тел (Рис. 2). Мы учли нелинейные дисперсионные соотношения с упрощенной изотропной аппроксимацией путем подгонки полиномов к кривым дисперсии фононов сред вдоль кристаллографического направления [100]. Благодаря этому мы впервые получили граничные условия интерфейса, зависящие, как от угла падения волны на интерфейс, так и от частоты волны.

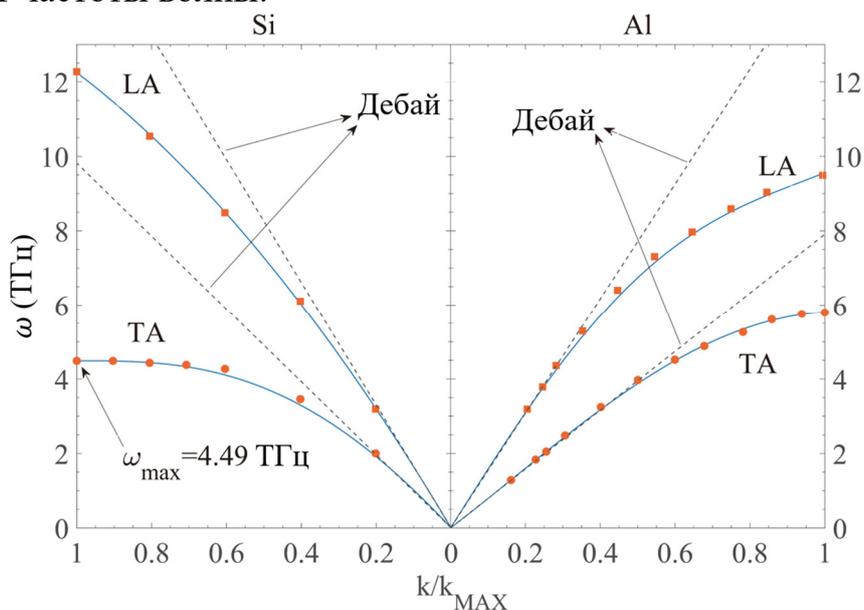


Рис. 2. Дисперсии алюминия (слева) и кремния (справа) вдоль направления [100]. Измеренные кривые представлены квадратами (LA) и кружками (TA). Сплошная линия – результат полиномиальной аппроксимации реальных дисперсий в данной работе. Пунктирные линии – линейные дисперсионные соотношения с использованием приближения Дебая

Отношение амплитуд генерируемых волн к падающей волне  $A_n/A_0$  определено путем решения уравнений, представляющих граничные условия на поверхности интерфейса: равенства деформаций и механических напряжений на обеих сторонах интерфейса. Результат: определение энергий преломлённых на интерфейсе волн. Впоследствии мы определяем угловое и частотное распределения коэффициентов переноса энергии  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  для трех падающих мод упругих волн Р, SV и SH. Кроме того, в процессе расчета мы учли критическую частоту и влияние полного внутреннего отражения. На Рис. 3 представлены полные

частотные и угловые распределения коэффициентов переноса энергии на основе теория упругих волн.

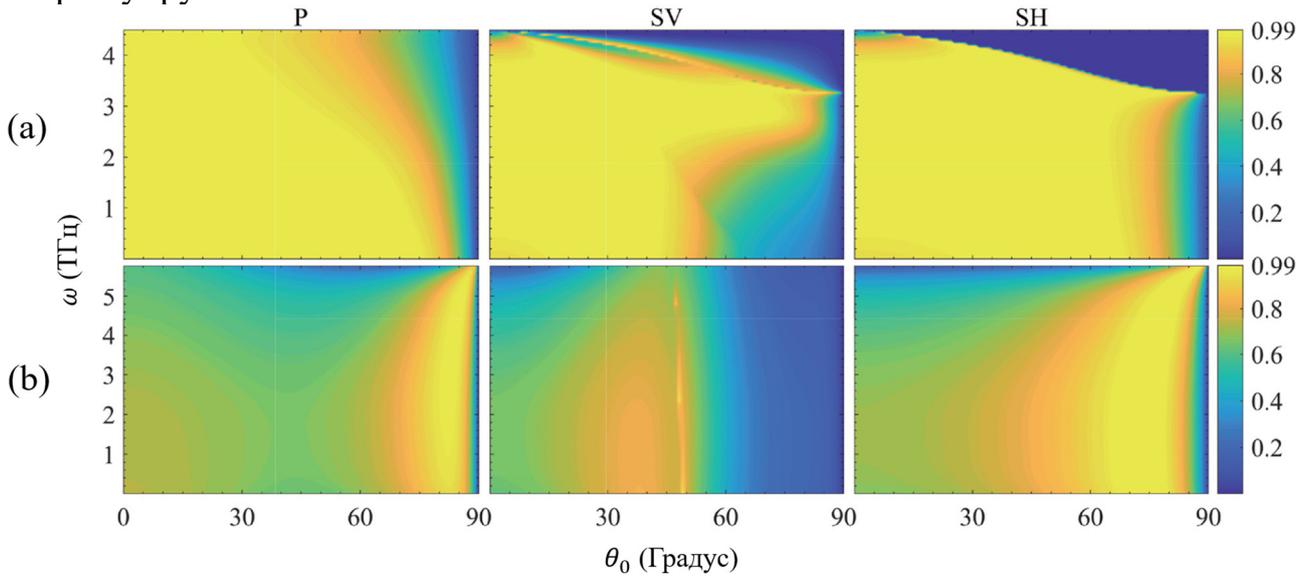


Рис. 3. Коэффициента переноса энергии как функции частоты и угла падения фононов для мод P, SV и SH на интерфейсе (a) Al/Si и (b) Al/Алмаз

Как показано на Рис. 3 (b),  $\theta_0$  может существенно повлиять на  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$ , особенно на интерфейсе Al/Алмаз. Для  $\theta_0 = 90$  градусов (скользящее падение),  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  уменьшается до нуля.  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  мала для высокочастотных волн, что может быть связано с низкой групповой скоростью на краю зоны Бриллюэна, как показано на Рис. 2. На Рис. 3 (a) на интерфейсе Al/Si решающим является вклад волн с частотами менее 4 ТГц, а  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  близко к единице практически во всем диапазоне распределения. Подставляя  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  в формулу Ландауэра, можно рассчитать ПК на интерфейсе.

Рис. 4 (a) и (b) показывают, что предлагаемая модель ПК значительно улучшает прогнозирование ПК по сравнению с традиционным DMM и АММ, особенно при температурах выше 100 К с ошибками в пределах 5% на интерфейсе Al/Si и 30% на интерфейсе Al/Алмаз.

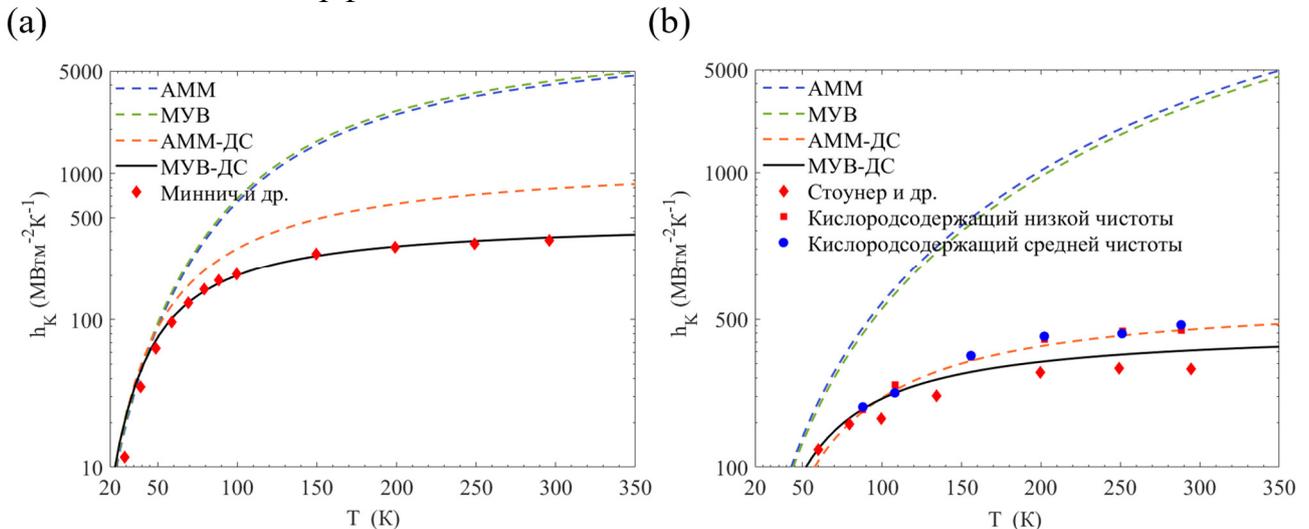


Рис. 4. Теоретические и измеренные значения ПК на интерфейсе (a) Al/Si и (b) Al/Алмаз в зависимости от температуры. Точки – экспериментальные измерения из предыдущих работ. Сплошные линии представляют общий ПК,

полученный с использованием модели ТУВ-ДС (Теория упругих волн с учетом дисперсионного соотношения), а пунктирные линии указывают на теоретические результаты при различных приближениях

Более ранние работы, выполненные по значительному влиянию интерфейсных условий на ПК между твердыми телами, предполагают, что различия в интерфейсной связи или шероховатости могут играть роль в теплопроводности между твердыми телами, особенно при высоких температуры. Измерения ПК (кружки и квадраты) на Рис. 4 (b) показывают, что образцы с разными уровнями чистоты (низкая чистота и средняя чистота) дали сопоставимые результаты, формирование структуры зерна Al не сильно зависит от химического состава поверхности алмаза, что позволяет предположить, что прочность интерфейсной связи влияет на ПК.

В Главе 3 представлена сформулированная физико-математическая модель и результаты расчётных исследований влияния шероховатости интерфейса и промежуточного слоя на ПК.

Приближение Кирхгофа широко используется для определения рассеяние волн на шероховатой поверхности. В приближении Кирхгофа предполагается, что любая точка на профиле шероховатой поверхности является локально плоской и падающая волна зеркально отражается в этой точке (Рис. 5).

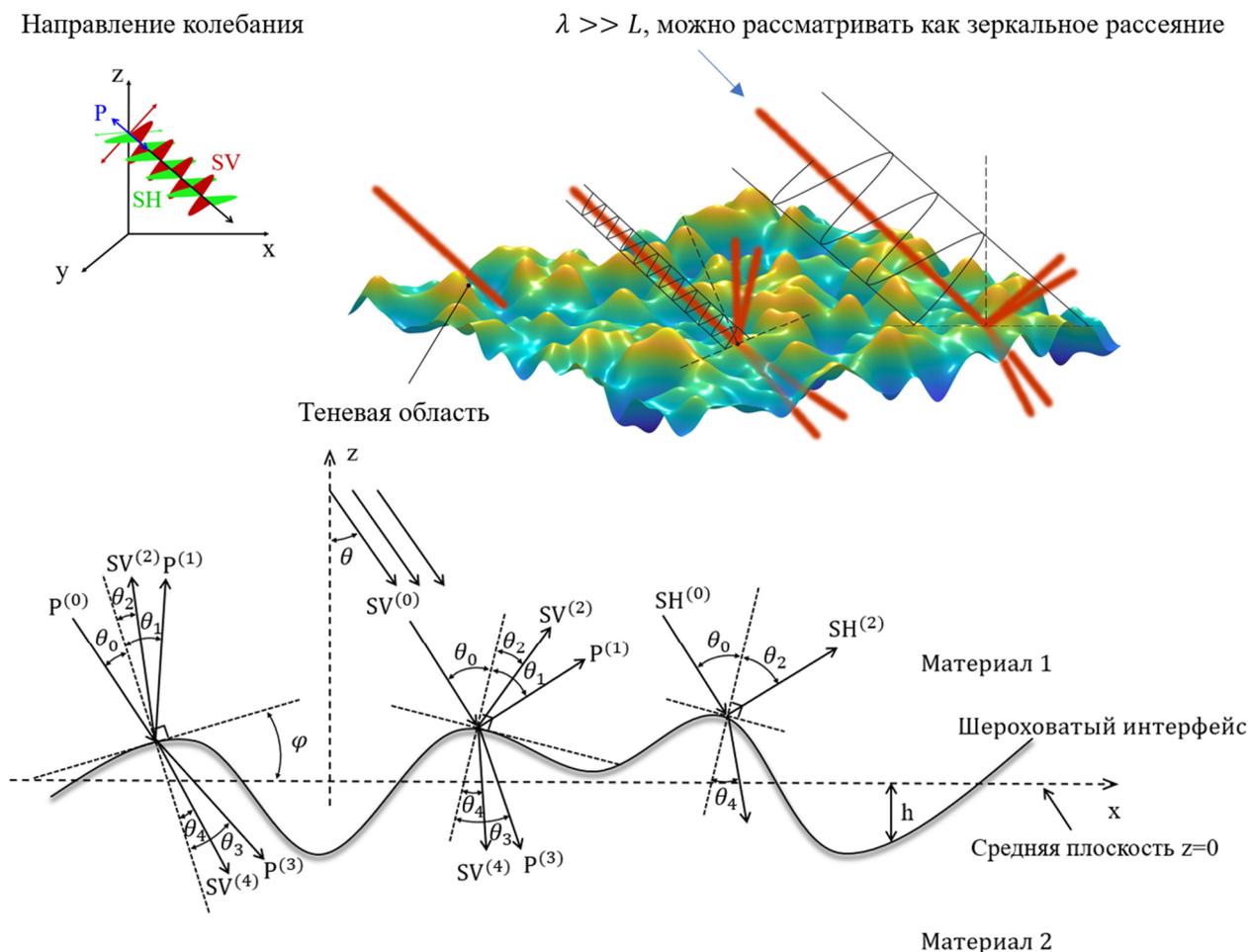


Рис. 5. Отражение и преломление падающих волн на шероховатом интерфейсе.  $\theta_n$  – угол между соответствующей волной и нормалью касательной плоскости,

$\theta$  – угол между падающей волной и нормалью к средней плоскости  $z = 0$ ,  $\varphi$  – угол наклона касательной плоскости

В этом случае рассеяние волны в зеркальной точке описывается характеристиками отражения на касательной плоскости точки, а результирующие рассеянные волны складываются из вкладов всех зеркальных точек вдоль интерфейса. Шероховатость интерфейса оценивается статистическим описанием. Профиль шероховатой поверхности представлен как  $z = h(x)$ , а  $h$  – отклонение высоты поверхности от средней плоскости  $z = 0$ . Предполагая, что грубый интерфейс подчиняется гауссовскому распределению, функция плотности вероятности  $h$  равна:  $W_h(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{h^2}{2\sigma^2}\right)$ , где  $\sigma = \sqrt{\langle h^2 \rangle}$  – среднеквадратичная (RMS) шероховатость. Наклон интерфейса  $\chi$  как производная от  $h$  также распределен по Гауссу:  $W_\chi(\chi) = \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\chi^2}{2\gamma^2}\right)$ , где  $\gamma$  – среднее значение  $\chi$  в направлении  $x$ , определяемое следующим образом:  $\gamma = \sigma/L$ ,  $L$  – корреляционная длина и характеризует изменение высоты в поперечном направлении. Метод Кирхгофа также требует распределение угла наклона  $\varphi$ . Согласно соотношению между непрерывной случайной величиной  $\chi$  и  $\varphi$ :  $\chi = \tan\varphi$ , получена функция вероятности:  $W_\varphi(\varphi) = \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}\cos^2\varphi} \exp\left(-\frac{\tan^2\varphi}{2\gamma^2}\right)$ , как показано на Рис. 6 (а).

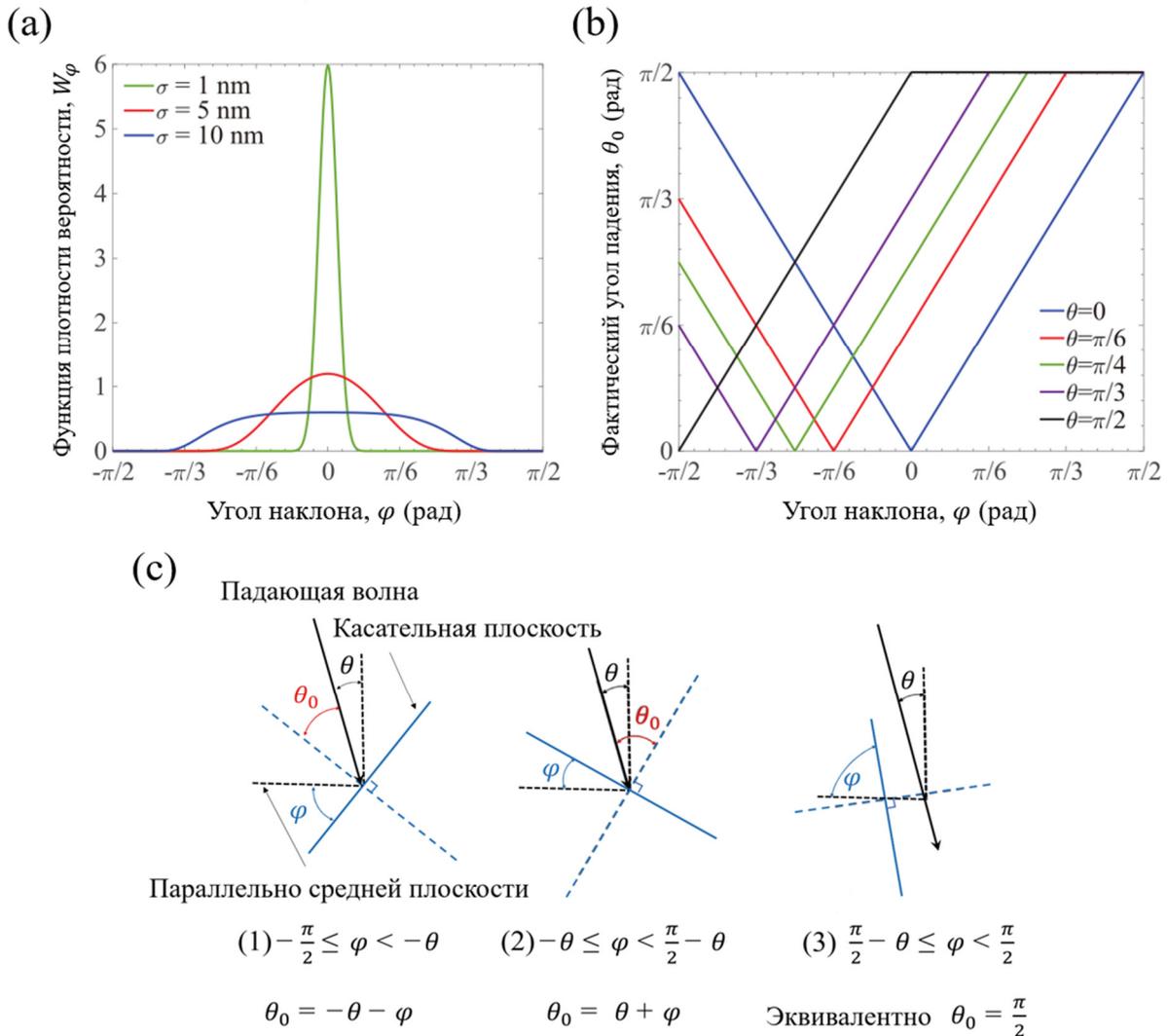


Рис. 6. (а) Распределение вероятности угла наклона  $\varphi$  на шероховатом

интерфейсе при  $\sigma=1, 5, \text{ и } 10$  нм, и  $L=15$  нм. (b) Расчетный фактический угол падения  $\theta_0$  как функция угла наклона  $\varphi$ :  $\theta_0 = \theta_0(\theta, \varphi)$ . (c) Схема трех случаев фактического угла падения  $\theta_0$  на касательную плоскость

Далее определяем реальный угол падения  $\theta_0$  волны в произвольном направлении  $\theta$  в некоторую точку с углом наклона  $\varphi$ :  $\theta_0 = \theta_0(\theta, \varphi)$ . В модели ПК, угол  $\theta$  изменяется от  $0$  до  $\pi/2$ , а диапазон  $\varphi$ :  $-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2$ . На Рис. 6 (c) показаны три случая падения волны в разных направлениях в определенную точку на шероховатой поверхности раздела. Подчеркнем, что при увеличении  $\varphi$  и  $\varphi \geq \pi/2 - \theta$  очевидно, что падающая волна «пропустит» точку, и энергия через эту точку не передается. Это эквивалентно случаю, когда волна скользит по интерфейсу,  $\theta_0 = \pi/2$ , и эта точка принадлежит «области тени», как показано на Рис. 6 (a). На Рис. 6 (b) представлены расчетные кривые  $\theta_0(\theta, \varphi)$ . Подставляя  $\theta_0 = \theta_0(\theta, \varphi)$  в уравнения коэффициент переноса энергии  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta_0, \omega)$  и с помощью уравнения  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j, eff}(\theta, \omega) = \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta, \varphi, \omega) W_{\varphi}(\varphi) d\varphi$  определяем эффективный коэффициент переноса энергии  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j, eff}(\theta, \omega)$  на шероховатом интерфейсе.

Мы вычисляем эффективный коэффициент переноса энергии  $\alpha_{1 \rightarrow 2, j}(\theta, \omega)$  на идеально гладком ( $\sigma=0$ ) и шероховатом ( $\sigma=1, 5, \text{ и } 10$  нм) интерфейсах Al/Si соответственно (Рис. 7). В расчете мы использовали шероховатый интерфейс с распределением по Гауссу и корреляционной длиной  $L=15$  нм.

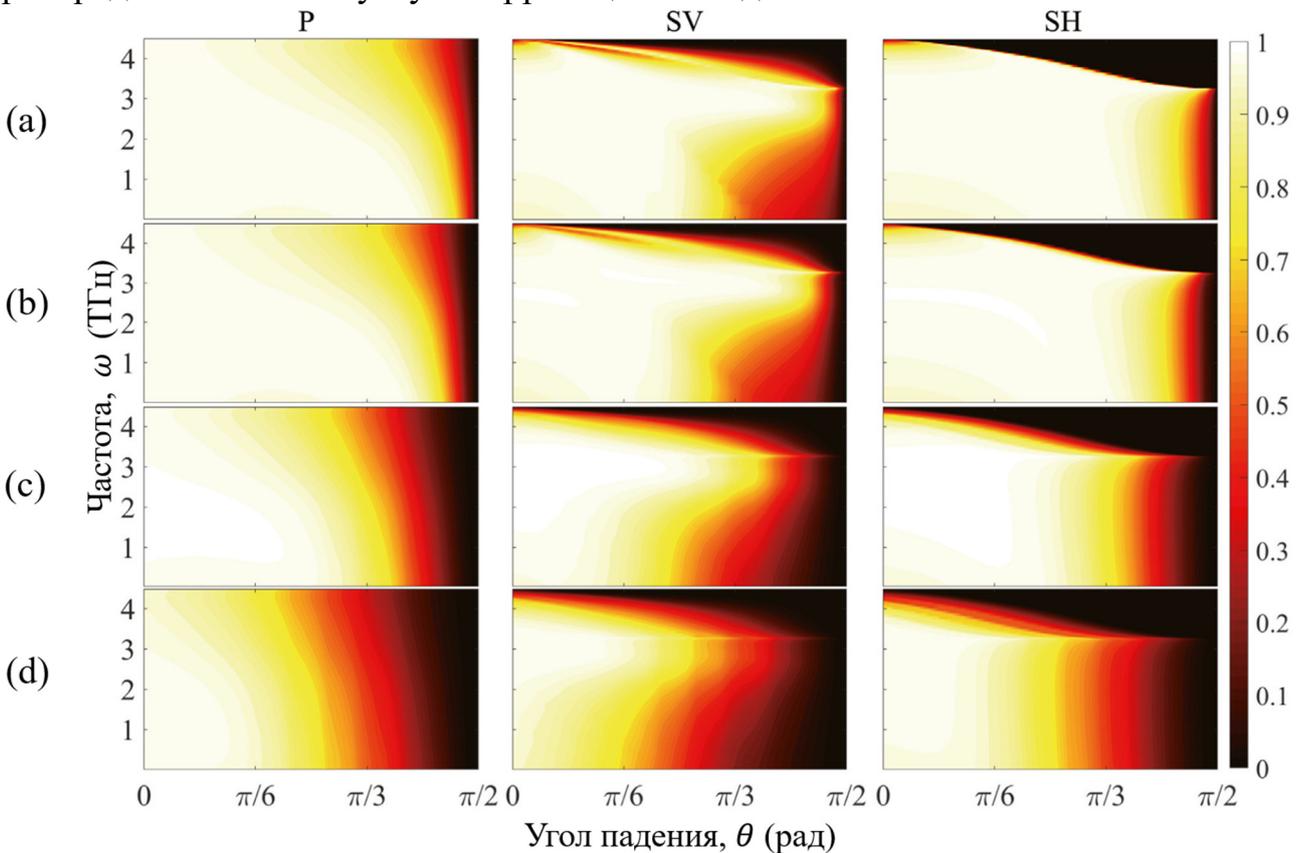


Рис. 7. Контурные графики коэффициента переноса энергии как функции угла падения и частоты для волн P, SV и SH на интерфейсах Al/Si: (a) гладкие, (b) RMS шероховатость  $\sigma=1$  нм, (c)  $\sigma=5$  нм и (d)  $\sigma=10$  нм

Очевидно, что как частота фононов, так и угол падения существенно влияют

на тепловой транспорт. Передача падающих волн SV и SH имеет четкое падение, когда их частота превышает 3 ТГц, в то время как тенденция Р-волны во всем частотном диапазоне является плоской. Это явление объясняется низкими скоростями поперечных поляризаций  $v_{g,TA}(\omega)$  на краю первой зоны Бриллюэна. В частотном режиме ТГц вклад низкочастотных фононов обычно выше, чем фононов высокой частоты.

Модель упругих волн также дает представление об изменении взаимодействия фононов с поверхностью раздела с шероховатостью поверхности. Как показано на Рис. 7, общая тенденция коэффициента переноса энергии уменьшается с увеличением шероховатости, особенно для фононов вблизи нормального падения. Однако следует отметить, что при  $\sigma < 1$  нм коэффициенты переноса энергии шероховатого и гладкого интерфейса очень близки. Это показывает, что модель упругих волн гладкого интерфейса без учета интерфейсных неоднородностей также подходит для предсказания ПК атомно-гладкого интерфейса (величина  $\sigma$  составляет субнанометры,  $10^{-10}$  м).

Для дальнейшей проверки модели мы вычисляем ПК при комнатной температуре как функцию интерфейсной шероховатости и сравниваем ее с экспериментальными исследованиями [Рис. 8 (a)].

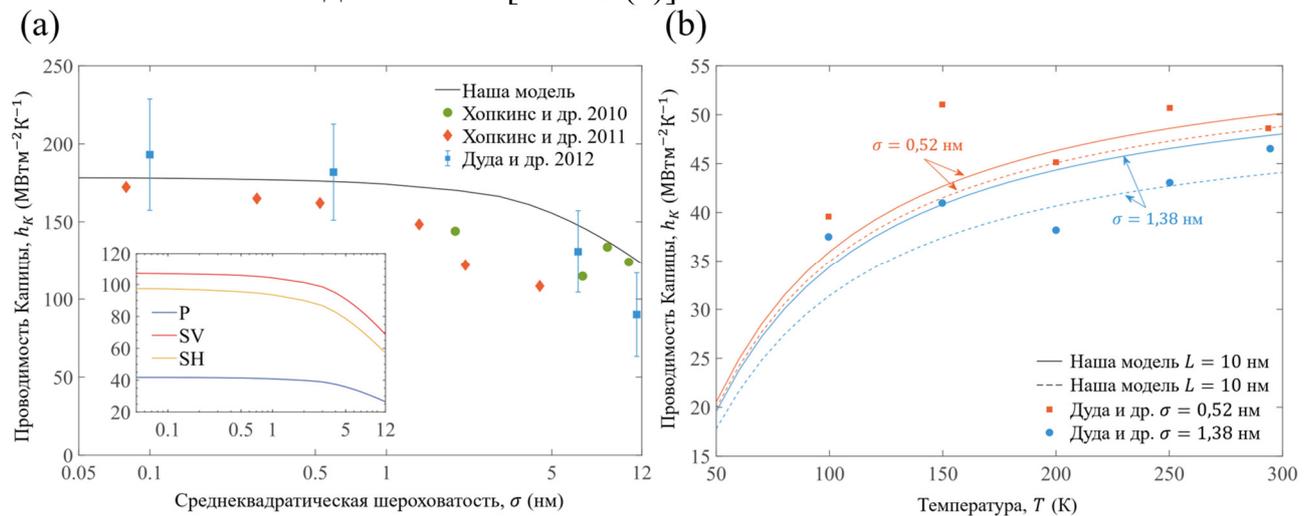


Рис. 8. (a) Расчетная и измеренная ПК шероховатых интерфейсов Al/SiO<sub>2</sub>/Si при комнатной температуре в зависимости от RMS шероховатости  $\sigma$ . На вставке показан вклад волн P, SV и SH в общий ПК. (b) Расчетные и измеренные ПК интерфейсов Au/SiO<sub>2</sub>/Si со RMS шероховатостью  $\sigma=0,52$  и 1,38 нм. Сплошные и пунктирные линии представляют собой теоретические результаты с корреляционной длиной  $L = 10$  нм и 5 нм соответственно

Для сравнения с этими экспериментами необходимо учитывать еще один фактор – термическое сопротивление, вызванное слоем собственного оксида (SiO<sub>2</sub>) на поверхности оксида Si-подложки. Это термическое сопротивление обычно аппроксимируется делением толщины слоя естественного оксида на его теплопроводность, а теплопроводность этого слоя может быть выражена как:  $h_{oxide} = R_{oxide}^{-1} = \kappa_{oxide}/d_{oxide}$ , где толщина доксида собственного оксида на поверхности образца составляет приблизительно 2 нм, измеренная с помощью просвечивающей электронной микроскопии, а его теплопроводность  $\kappa_{oxide}$

обычно принимается за теплопроводность объемного материала. Эффективный ПК на интерфейсе с естественным оксидным слоем определяется выражением  $h_K = (h_{K,EWM}^{-1} + h_{oxide}^{-1})^{-1}$ .

И мы сравниваем модель с экспериментальными данными ПК для интерфейса Au/SiO<sub>2</sub>/Si с шероховатостью  $\sigma = 0,52$  нм и 1,38 нм, как показано на Рис. 8 (b). Толщина слоя SiO<sub>2</sub> между интерфейсом Au/Si составляет 2 нм, и результаты модели упругих волн с корреляционной длиной  $L$  от 5 до 10 нм согласуются с экспериментальными значениями. Это указывает на то, что упругий процесс преобладает на интерфейсе с наноразмерной шероховатостью.

**В Главе 4** представлены физико-математическая модель волнового эффекта фононов в многослойной интерфейсной наноструктуре и расчет эффективной теплопроводности сверхрешётки (СР).

На Рис. 9 (a) изображена типичная сэндвич-структура в реальных измерениях: конечная бинарная СР, выращенная на полупроводниковой подложке с нанесенным на нее металлическим слоем нагревателя/детектора. В определенном слое СР все прошедшие (отраженные) волны с одним и тем же экспоненциальным множителем могут быть суммированы в результирующую волну с неопределенной амплитудой. Из-за преобразования моды волн на интерфейсе [Рис. 9 (b)], в каждом слое есть четыре результирующих волны для падающей волны SV (или P), как показано на Рис. 9 (a). А падение SH-волн не сопровождается связью поперечных и продольных волн.

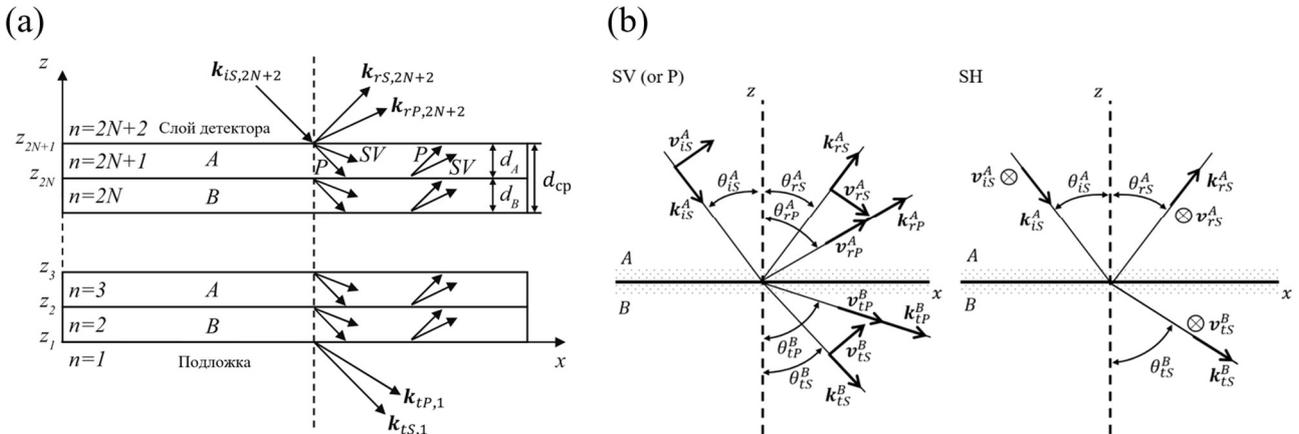


Рис. 9. (a) Распространение фононов в системе металл-СР-подложка. СР состоит из чередующихся слоев материала А и В с толщиной  $d_A$  и  $d_B$ , соответственно, и толщиной периода СР  $d_{CP} = d_A + d_B$ . Интерфейсы, обозначенные  $z_n$ , параллельны плоскости x-y. (b) Зеркальное отражение и прохождение плоских волн на интерфейсе между изотропными полубесконечными средами А и В

Метод матрицы переноса широко используется для связи амплитуд волн между двумя разными точками внутри упругой системы. Поскольку тангенциальные компоненты смещений и напряжений являются непрерывными через упругий интерфейс, когда поверхностная волна отсутствует, метод матрицы переноса можно легко распространить на многослойные структуры для расчета коэффициента переноса энергии (отношения амплитуд) решеточных волн. Продольная теплопроводность  $\kappa_{\perp}$  вычисляется по формуле  $\kappa_{\perp,CP} = h_{K,CP} L_{CP}$ , где  $L_{CP}$  – общая длина СР, а проводимость  $h_{K,CP}$  вычисляется путем суммирования по

всем передачам энергоносителей в соответствии с транспортным формализмом Ландауэра.

Верность метода континуума или фононных волн подтверждается измерением  $\kappa_{\perp,CP}$  серии короткопериодных CP GaAs / AlAs с фиксированной периодической толщиной 24 нм, как показано точками на Рис. 10 (a) и (b). В этой известной экспериментальной работе линейная зависимость между  $\kappa_{\perp,CP}$  и числом периодов предполагает когерентный перенос тепла в этих CP. Если фононы распространяются чистым поведением частиц,  $\kappa_{\perp,CP}$  с фиксированной толщиной периода не должно зависеть от общей длины, потому что каждый интерфейс действует как термический резистор. Наш расчет достаточно хорошо согласуется с экспериментом для CP до 7 периодов, демонстрируя, что в этих случаях в переносе преобладает когерентная передача.

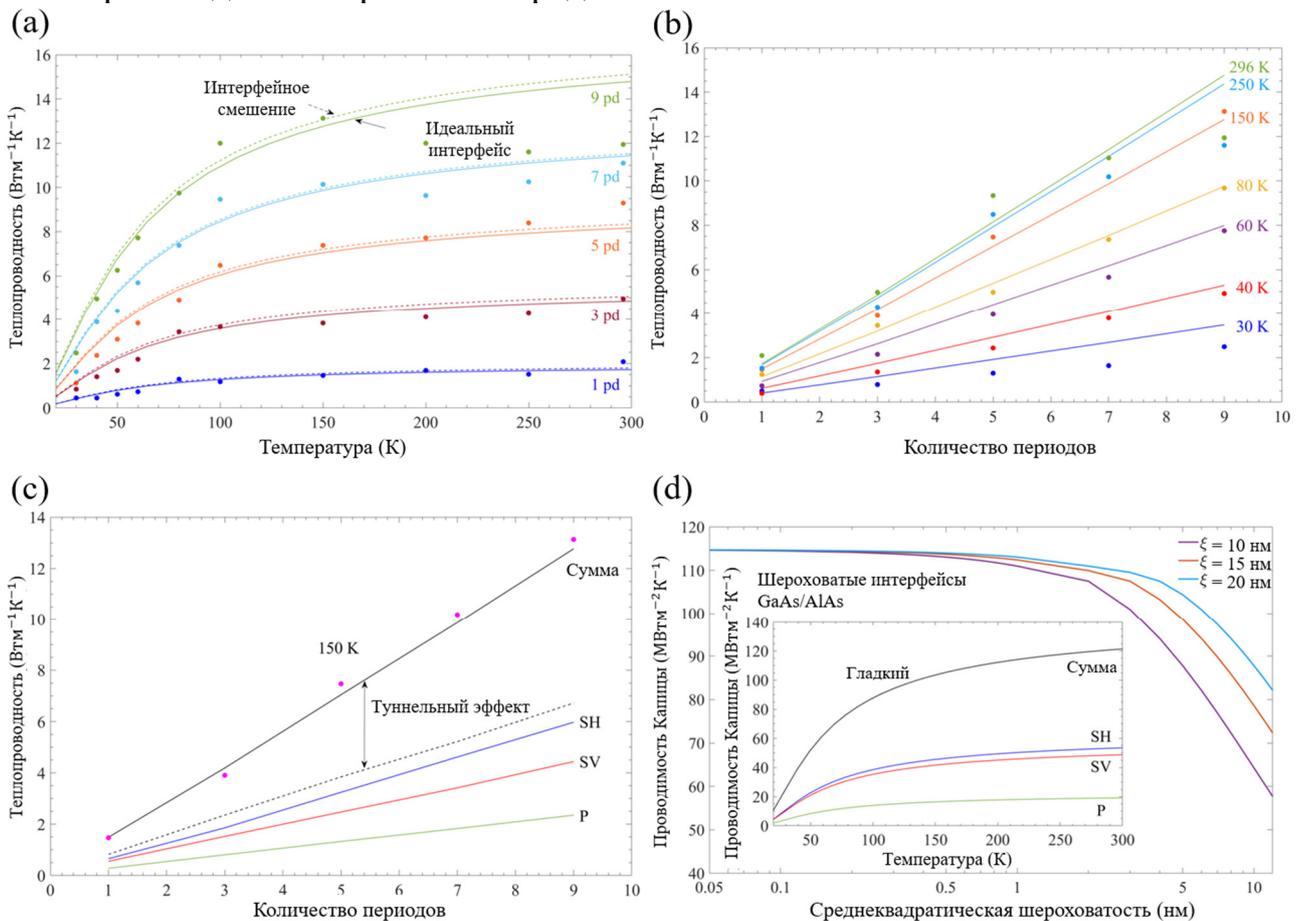


Рис. 10. (a) Продольная теплопроводность  $\kappa_{\perp,CP}$  CP GaAs/AlAs как функция температуры от 1 до 9 периодов. (b)  $\kappa_{\perp,CP}$  в зависимости от количества периодов для разных температур. (c) Вклады волн с разной поляризацией в общую  $\kappa_{\perp,CP}$  при 150 K (сплошные линии), пунктирная линия рассчитана  $\kappa_{\perp,CP}$  без вклада туннельных фононов. (d) Расчетное значение ПК  $h_{K,CP}$  на интерфейсах GaAs/AlAs с RMS шероховатостью, изменяющейся от 0,05 нм до 12 нм, когда длина корреляции  $\xi$  составляет 10, 15 и 20 нм. На вставке показаны значения  $h_{K,CP}$  в зависимости от температуры на гладком интерфейсе GaAs/AlAs

Когерентность волн или фононов означает, что в различных пространственных точках волны колебания происходят синхронно, то есть разность фаз между двумя точками не зависит от времени. Процесс декогеренции — нарушение

когерентности, вызываемое взаимодействием фононов с окружающей средой (шероховатым интерфейсом).

В дополнение к этим тенденциям  $\kappa_{\perp}$  расчет фононной волны также позволяет нам количественно оценить влияние внутренних и реальных внешних факторов на когерентный перенос тепла. На Рис. 10 (с) показаны различные вклады поляризации каждой волны при 150К, что связано с эффектом ограничения, вызванным рассогласованием спектров, полным внутренним отражением и взаимодействием волн. На Рис. 10 (d) показаны расчетные ПК на различных интерфейсах GaAs/AlAs. Когда величина среднеквадратичной шероховатости достигает нескольких нанометров, интерфейсные нарушения постепенно будут оказывать значительное влияние на фононную теплопередачу. Для когерентного переноса диффузное рассеяние на интерфейсе оказывает меньшее влияние на доминирующие длинноволновые фононы с длинами волн намного больше, чем масштаб интерфейсной шероховатости.

### ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Показано, что современные модели переноса тепла через интерфейсы дают хорошее согласие с экспериментом только при низких температурах (до 30 К), так как не учитывают дисперсионные свойства упругих волн. Предложена модель, учитывающая зависимости частот волн от волновых векторов. Эта модель обеспечивает согласие с экспериментом, как минимум, до 300 К.
2. Показано, что существует явление, аналогичное явлению полного внутреннего отражения, но связанное с «критической частотой», а не с критическим углом. Учёт этого явления, наряду с учётом дисперсии, обеспечивает хорошее согласие теории с экспериментом.
3. Модель упругих волн обеспечивает глубокое понимание процесса рассеяния фононов на интерфейсе. Полученный полный спектр угла падения и частоты для коэффициента переноса энергии фононов показывают, что зеркальное рассеяние низкочастотных фононов доминирует в переносе энергии, а изменение угла падения сильно влияет на процесс передачи.
4. Впервые поставлена и решена задача об определении ПК через шероховатые интерфейсы. На основе предложенной модели упругих волн, получены эффективные коэффициенты переноса энергии фононов на гауссовском шероховатом интерфейсе с помощью статистических методов и аппроксимации Кирхгофа. Полученное прогнозируемое значение хорошо согласуется с экспериментальным значением интерфейса с нанометровой шероховатостью.
5. Полученные результаты показывают, что, когда среднеквадратичная шероховатость интерфейса  $\sigma$  меньше 1 нм, её влияние на ПК слабее. При дальнейшем увеличении  $\sigma$  ПК будет значительно уменьшаться. Когда шероховатость  $\sigma$  до 12 нм, ПК на Al/Si интерфейсе уменьшается примерно на 30%.
6. Модель расширена на мультиинтерфейсные наноструктуры с помощью метода матрицы переноса. И впервые получено точное прогнозируемое значение линейной теплопроводности сверхрешётки, которое интерпретируется как результат взаимодействия между собственными фононными волновыми эффектами (т.е. эффектами интерференции, туннелирования и удержания).
7. Сравнивая длину волны фононных волн  $\lambda$  и толщину периода сверхрешётки

$d_{\text{CP}}$ , мы качественно разделяем фононы на когерентную ( $\lambda \geq d_{\text{CP}}$ ) и некогерентную часть ( $\lambda < d_{\text{CP}}$ ) и наблюдаем минимум теплопроводности GaAs/AlAs сверхрешётки с изменяющимся  $d_{\text{CP}}$ , что доказывает переход фононов от некогерентной теплопередачи к когерентной теплопередаче.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Liu B., Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Wang M. Effect of interfacial roughness on thermal boundary conductance: An elastic wave model using the Kirchhoff approximation // International Journal of Mechanical Sciences. 2022. V. 218, № 106993 (1,27 п.л./0,59 п.л.).
2. Liu B., Khvesyuk V.I. Analytical model for thermal boundary conductance based on elastic wave theory // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2020. V. 159, № 120117 (1,04 п.л./0,52 п.л.).
3. Лю Б., Хвесюк В.И., Баринов А.А. Моделирование проводимости Капицы через шероховатые интерфейсы между твердыми телами // Физика твердого тела. 2021. Т. 63, № 7. С. 982-987 (0,69 п.л./0,34 п.л.).
4. Баринов А.А., Лю Б., Хвесюк В.И., Чжан К. Обновленная модель расчета теплопроводности тонких пленок кремния и германия // Ядерная физика и инжиниринг. 2018. Т. 9, № 5. С. 433-444 (1,27 п.л./0,54 п.л.).
5. Хвесюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы между твердыми телами // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46, № 19. С. 42-46 (0,58 п.л./0,19 п.л.).
6. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. A new technique for modelling phonon scattering processes at rough interfaces and free boundaries of solids // Journal of Physics: Conference Series. 2022. V. 2150, № 012021 (0,69 п.л./0,23 п.л.).
7. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Generalized model of Kapitza conductance across rough interfaces // Journal of Physics: Conference Series. 2021. V. 2057, № 012110 (0,46 п.л./0,15 п.л.).
8. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Calculation of thermal boundary resistance based on the analysis of elastic waves propagating at the interface // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1565, № 012025 (0,69 п.л./0,23 п.л.).
9. Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Liu B., Qiao W. A review to the specific problems of nano thermal physics // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1683, № 022073 (0,69 п.л./0,17 п.л.).
10. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Development of acoustic and diffuse mismatch models for predicting the Kapitza resistance // Journal of Physics: Conference Series. 2019. V. 1382, № 012155 (0,69 п.л./0,23 п.л.).
11. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A new look at Kapitza conductance calculation (thermal boundary resistance) // Journal of Physics: Conference Series. 2019. V. 1368, № 042035 (0,69 п.л./0,23 п.л.).
12. Баринов А.А., Чжан К., Лю Б., Хвесюк В.И. Развитие методов расчета теплопроводности тонких пленок // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2017. № 06. С. 56–71 (1,85 п.л./0,62 п.л.).
13. Баринов А.А., Чжан К., Лю Б. Анализ и сравнение различных приближений расчета теплопроводности тонких пленок в продольном направлении //

Сборник трудов Юбилейной конференции Национального комитета РАН по тепло- и массообмену «Фундаментальные и прикладные проблемы теплообмена». Санкт-Петербург. 22-26 мая 2017 г. С. 91-92 (0,23 п.л./0,08 п.л.).

14. Баринов А.А., Лю Б. Теплоемкость и теплопроводность нанопленок и нанонитей кремния и германия // Сборник трудов XV Российской конференции (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ. Москва. 15-17 октября 2018 г. С. 126 (0,12 п.л./0,06 п.л.).
15. Баринов А.А., Лю Б., Чжан К. Оценка вкладов различных механизмов взаимодействий фононов в диффузионно-баллистических режимах // Сборник трудов Седьмой Российской национальной конференции по теплообмену. Москва. 22-26 октября 2018 г. С. 209-212 (0,46 п.л./0,15 п.л.).
16. Хвесьюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы // Сборник трудов V международной конференции и молодежной школы «Информационные технологии и нанотехнологии». Самара. 21-24 мая 2019 г. С. 77-82 (0,69 п.л./0,23 п.л.).
17. Баринов А.А., Лю Б., Хвесьюк В.И. Модифицированная модель расчета сопротивления Капицы (теплового контактного сопротивления) // Сборник трудов Всероссийской научно-технической конференции молодых учёных и специалистов «Авиационные двигатели и силовые установки». Москва. 28-30 мая 2019 г. С. 359-361 (0,35 п.л./0,12 п.л.).
18. Хвесьюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Расчет сопротивления Капицы на основе анализа распространения упругих волн на интерфейсах // Сборник трудов Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «XXXV Сибирский теплофизический семинар», посвящённый 75-летию д.т.н., профессора В.И. Терехова. Новосибирск, 27-29 августа 2019 г. С. 285 (0,12 п.л./0,04 п.л.).
19. Хвесьюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Моделирование процесса распространения тепла через термоинтерфейсы // Сборник трудов конференции «XI Семинар вузов по теплофизике и энергетике»: материалы Всероссийской научной конференции с международным участием. Санкт-Петербург. 21-23 октября 2019 г. С. 412-413 (0,23 п.л./0,08 п.л.).
20. Хвесьюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Обобщенная модель проводимости Капицы через шероховатые интерфейсы // Сборник трудов VI Всероссийской конференции «Теплофизика и физическая гидродинамика». Севастополь. 22-29 августа 2021 г. С. 254 (0,12 п.л./0,04 п.л.).
21. Баринов А.А., Лю Б., Хвесьюк В.И. Новая методология моделирования процессов рассеяния фононов на шероховатых интерфейсах и свободных границах твердых тел // Сборник трудов XII семинара вузов по теплофизике и энергетике. Сочи. 25-27 октября 2021 г. С. 14 (0,12 п.л./0,04 п.л.).
22. Хвесьюк В.И., Баринов А.А., Лю Б., Цяо В. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к наноэлектронике // Сборник трудов Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Москва. 25-27 октября 2021 г. С. 92-94 (0,35 п.л./0,09 п.л.).