

УДК 536.2

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООВОГО ПЕРЕНОСА В СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Пхью Ньейн Зин, Бацева Д.А., Гуркина Е.Д., Белов Ю.С.

Калужский филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», г. Калуга (248000, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2.), e-mail: rakhinelay94@gmail.com

В твердых кристаллических материалах основным фактором, который может влиять на регуляцию теплообмена, является наличие различных дефектов. С учетом современных тенденций, проблема повреждения таких конструкционных материалов, как кристаллы, приобретает высокую актуальность. Кремний – это широко используемый полупроводниковый материал. В технологии кремния на изоляторе (SOI) в микроэлектронике структура подложки SOI может состоять из тонкого слоя кремнезема SiO_2 , который используется в качестве диэлектриков, отделяя моно кристаллический Si от утечки тока, а также улучшая его характеристики. Эти интерфейсы Si / SiO_2 могут выступать в качестве препятствий для теплового потока в микроэлектронике, где огромное количество тепла генерируется в очень ограниченных пространствах. В связи с этим очень важно понять тепловое сопротивление на данном интерфейсе. Метод динамики фононной волновой группы используется для изучения передачи фононов на границе частиц диоксида урана UO_2 . Границы структур, такие как плоские дефекты в кристаллических структурах, выступают в качестве препятствий для теплового переноса, так как они нарушают периодичность кристалла в направлении перпендикулярно его границам.

Ключевые слова: теплоперенос, кремний, уран, Капица, кристалл, дефект

RESEARCH OF PROCESSES OF HEAT TRANSFER IN LAYERED CRYSTAL STRUCTURES

Phyo Nyein Zin, Batceva D.A., Gurkina E.D., Belov Yu.S.

Kaluzhskij filial federal'nogo gosudarstvennogo byudzhetnogo obrazovatel'nogo uchrezhdenija vysshego obrazovaniya «Moskovskij gosudarstvennyj tehničeskij universitet imeni N.E. Baumana (nacional'nyj issledovatel'skij universitet)», Kaluga (248000, Kaluga, Bazhenova st, 2.), e-mail: rakhinelay94@gmail.com

In solid crystalline materials, the main factor that regulates heat exchange is the presence of defects. Taking into account the current trends, the problem of damage to structural materials acquires high relevance. Silicon is a widely used semi-conducting material. In the silicon on insulator (SOI) technology in microelectronics, the SOI wafer structure is can be made up of a thin layer of SiO_2 , used as dielectrics, separating single crystalline Si from current leakage as well as improving performance. These Si/ SiO_2 interfaces can act as obstacles for heat flow in microelectronics, where a huge amount of heat is generated in very limited spaces. Therefore, it's very important to understand the thermal resistance at the interface. The phonon wave packet dynamics method is used to study the phonon transmission at a UO_2 twist grain boundary. Grain boundaries, as planar defects in crystal structures, act as obstacles to thermal transport as they break the periodicity of the crystal in the direction perpendicular to the boundaries.

Key words: heat transfer, silicon, uranium, Kapiza, crystal, defect

ВВЕДЕНИЕ

Передача тепла играет решающую роль в нашей повседневной жизни, а также в исследованиях в области материаловедения и техники. Существует множество применений, связанных с теплопередачей, которые можно в целом классифицировать по двум категориям: изоляция и рассеивание. В твердых кристаллических материалах основным фактором, который

регулирует теплообмен, является наличие дефектов. С учетом современных тенденций, проблема повреждения конструкционных материалов приобретает высокую актуальность [2].

Кристаллографические дефекты, в том числе точечные дефекты, дефекты линий, плоские дефекты и объемные дефекты, выступают в качестве препятствий для теплоносителей. Теплоносители могут взаимодействовать индивидуально с каждым дефектом и любыми комбинациями дефектов, что затрудняет разделение каждого механизма и эффекта.

ДВУОКИСЬ УРАНА

Диоксид урана (UO_2) является вездесущим как ядерное топливо и используется во всех американских коммерческих ядерных энергетических реакторах [4]. Среди его преимуществ по сравнению с металлическими топливами - высокая температура плавления и тот факт, что структура флюорита достаточно открыта для размещения продуктов деления без неприемлемых уровней набухания.

UO_2 имеет структуру флюоритового типа, которая относится к граничной кубической кристаллической системе ($Fm\bar{3}m$, пространственная группа № 225 космической группы, Schönflies O_h^h). Его постоянная решетки составляет 5,4704 Å при 300 К; ячейка элемента показана на рисунке 1.

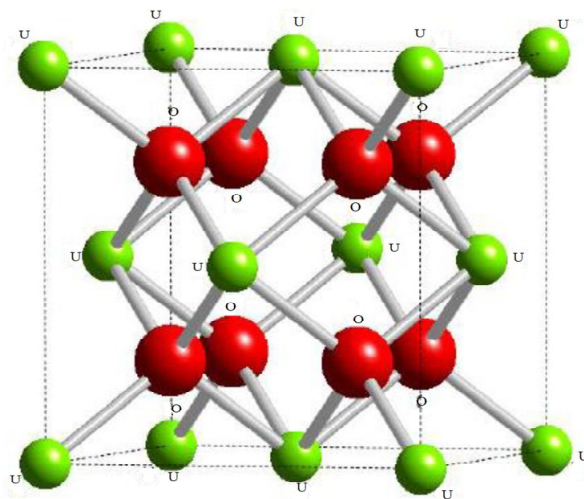


Рисунок 1 – Одиночная ячейка с флюоритовой структурой UO_2 . Красные сферы относятся к атомам кислорода, зеленые сферы относятся к атомам урана.

КРЕМНИЙ И КРЕМНЕЗЕМ

Кремний – хорошо известный и очень широко используемый полупроводниковый материал; диоксид кремния является очень хорошим диэлектрическим материалом, который обычно используется в качестве подложки или защитного слоя в сочетании с кремнием [8].

Силикагель, формально известный как диоксид кремния, имеет различные кристаллические структуры из-за гибкости связи O-Si-O, которая продемонстрирована на рисунке 2. Структурная форма, используемая в этом исследовании, является β -кристобалитом, поскольку она может образовывать минимальное несоответствие решетки с кремнием под конечным размером.

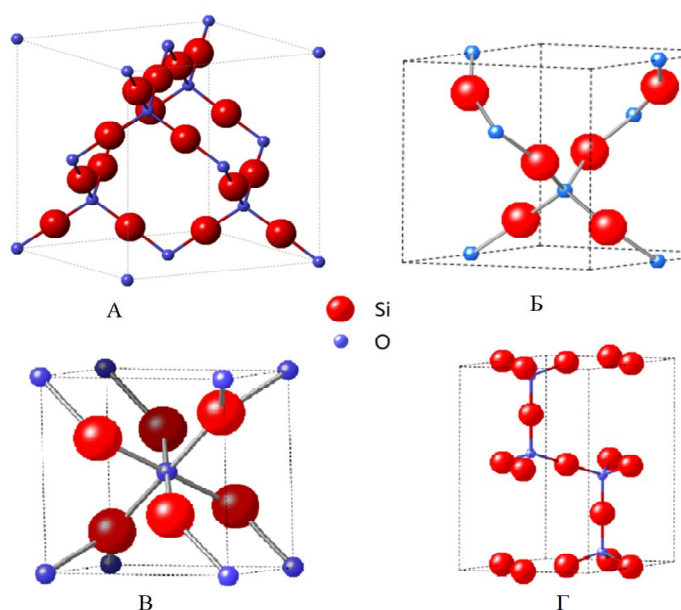


Рисунок 2 – Примеры кристаллических структур SiO₂.

А) β -кристобалит; Б) β – кварц; В) стишовит ; Г) тридимит

НАСТРОЙКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для исследования теплового переноса на границе Si/SiO₂ моделируемая структура была построена аналогично экспериментальной структуре Харли, где тонкий слой пленки SiO₂ зажат между двумя блоками кристалла Si [5]. Здесь два кристалла Si имеют одинаковую кристаллографическую ориентацию. Чтобы разделить работу между N_p процессорами можно перед началом моделирования равномерно распределить между ними N частиц рассматриваемой системы [3]. На рисунке 3 показаны схемы симуляции для динамики волновых пакетов и моделирования NEMD [6].

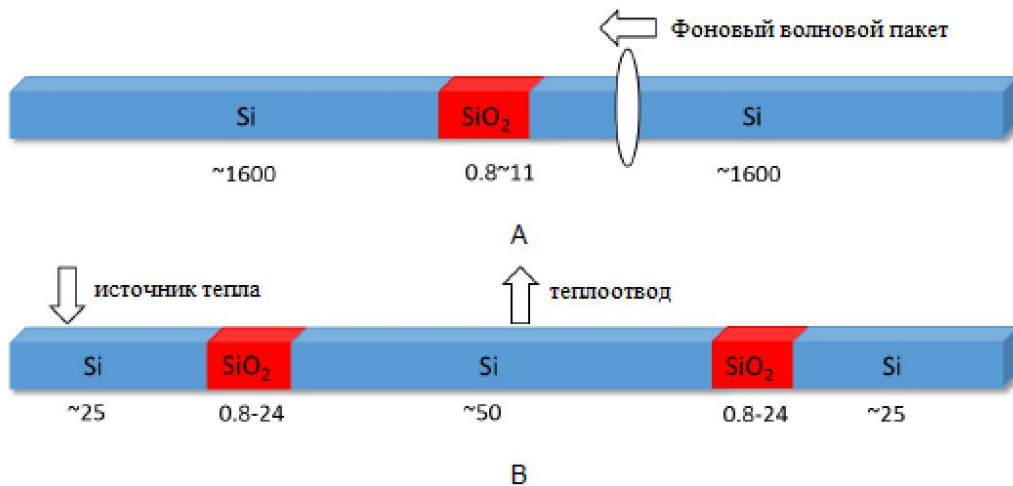


Рисунок 3 – Настройка моделирования для А) моделирования динамики волнового пакета; В) моделирования неравновесной молекулярной динамики. Цифры на рисунке указывают длину каждого блока и находятся в единицах нм.

ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ

Исследование начинается со слоистой структуры, которая имеет очень тонкий слой SiO₂ (толщина 0,8 нм). На рисунке 4 показано, как коэффициенты передачи энергии LA и LO-фононов для всех доступных k_{xy}-компонентов изменяются по мере увеличения частоты фононов.

Из рисунка 4 видно, что качественного изменения коэффициента передачи LO-мод по сравнению с режимами LA нет, то есть коэффициент пропускания в значительной степени зависит от частоты независимо от фононной симметрии.

$$R(\omega) = a\omega^b \quad (1)$$

где R - коэффициент отражения, ω - частота фононов, a и b - коэффициенты для соответствия.

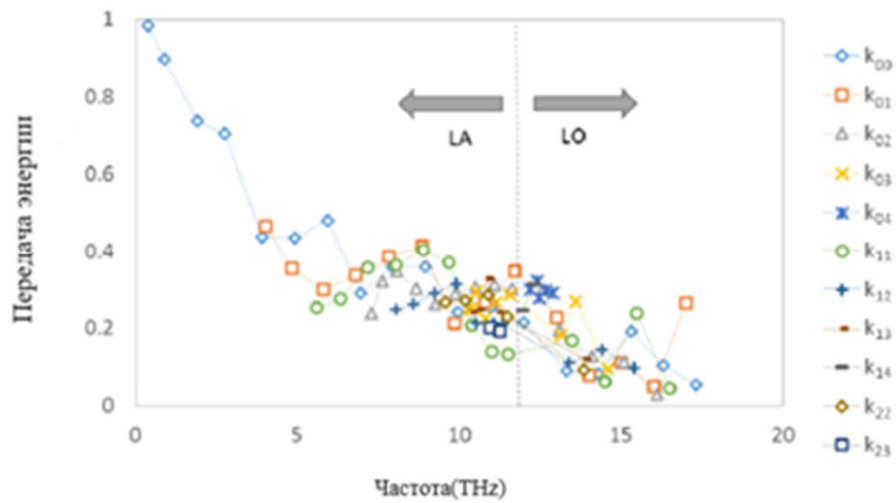


Рисунок 4 – Коэффициенты передачи для ветвей LA и LO как функция частоты падающих фононов. Точки слева от пунктирной линии принадлежат ветви LA, а справа – к ветви LO. Линии – направляющие

ФОНОННЫЕ РАССЕЙВАНИЯ В ИНТЕРФЕЙСЕ

Фононный пакет в области SiO₂ состоит из колебательных мод решетки Si. Простой расчет показывает, что длина волны, равная толщине слоя SiO₂ 0,8 нм, соответствует частоте ~ 10 ТГц. Это видно на рисунке 5, где показано, как передаваемая фононная энергия изначально чистых k₀₀-фононов рассеивается в различные k_{xy}-точки. Как можно видеть, когда частота инцидентов увеличивается, распределение передаваемой энергии в k_{xy} распространено более широко.

$$d_k = \sqrt{\frac{\sum_n |k_n - k_0|^2 E_n}{\sum_n E_n}} \quad (2)$$

Здесь k₀ - пик падающего фононного волнового вектора, k_n и E_n - переданный / отраженный фононный волновой вектор и соответствующая ему энергия, а суммирование производится по всему доступному фононному волновому вектору для передающих или отражающих фононов. d_k существенно измеряет, насколько средний фононный импульс отклоняется от его начального значения. Остальная часть импульса рассеивается в ненормальных направлениях, как показано на рисунке 5.

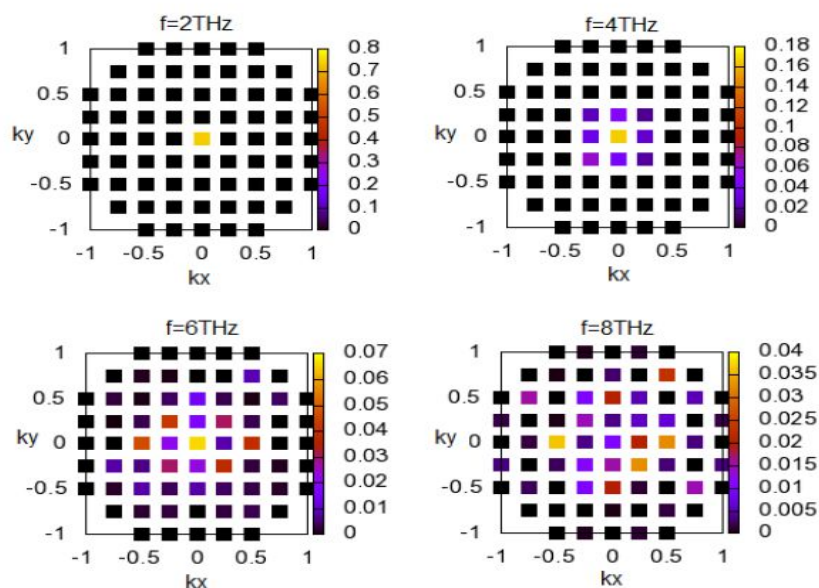


Рисунок 5 – Относительная передаваемая энергия в зависимости от k_x и k_y для четырех различных падающих фононных частот. Все показанные для k_{00} LA падающего фонона на $LSiO_2$ = 0,8 нм. Веса различны для каждой фигуры, и все k_x и k_y имеют единицу $2\pi/a_0$.

СОПРОТИВЛЕНИЕ КАПИЦЫ ПО МЕТОДУ NEMD

При деформации кристаллических структур наблюдается зависимость удельного сопротивления от механического напряжения (тензорезистивный эффект) [1].

Прямой метод используется для вычисления сопротивления Капицы из-за завихрения границ структур. Две границы структур (требуемые периодическим граничным условием вдоль L_z) расположены на $1/4 L_z$ и $3/4 L_z$, а два тонких слоя на краю и в центре L_z действуют как источник тепла и раковина, создавая тем самым желаемый тепловой ток [7].

ПЕРЕДАЧА ФОНОНОВ МЕТОДОМ PWD

Чтобы подробнее разобраться в рассеянии фононов на границах структур, для изучения того, как фононы с одинаковыми частотой и симметрией взаимодействуют на границах структур, используется метод молекулярной динамики фононных волн. Для выполнения PWD сначала необходимо получить соотношение дисперсии фононов. Дисперсия фононов рассчитывается с использованием GULP вдоль (001) направления. Хотя нет точного совпадения с экспериментом, потенциал Бускера дает разумные описания акустических фононных мод.

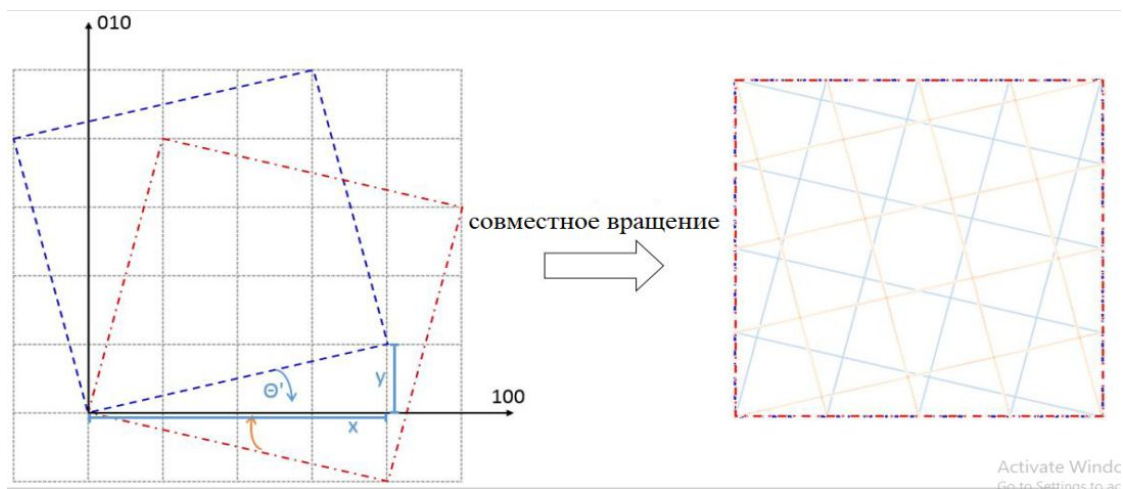


Рисунок 6 – Схематическая иллюстрация определения угла поворота для CSL кручения суммы границ структур (кубическая решетка)

ВЫВОДЫ

В этой работе исследовано сопротивление Капицы в слоистой структуре Si/SiO₂/Si подходами PWD и NEMD. Данные методы обеспечивают аналогичные значения для сопротивления Капицы Si/SiO₂; это значение также согласуется с экспериментальными результатами и предыдущими симуляциями. Подход PWD обеспечивает гораздо более подробную информацию о тепловом движении. В частности, для рассматриваемой здесь системы акустические фононы оказываются основным источником проводимости через границу раздела. Фононное ангармоническое рассеивание обеспечивает дополнительные каналы для переноса фононов. Передача энергии фононов на интерфейсе также анализируется с использованием PWD.

Список литературы

1. Аксютин Е.М., Гинзгеймер С.А., Клюквин Р.В., Устинов И.К. Моделирование влияния анизотропии и механических воздействий на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах // Электронный журнал: наука, техника и образование. 2016. №1 (5). С. 253-261. URL: <http://nto-journal.ru/uploads/articles/7009c7a4b743fafd3e70e73c2d1374aa.pdf> (дата обращения 18.04.2018)
2. Белов Ю.С., Гуров С.Г., Либеров Р.В., Логинов Б.М. Закономерности бесконтактного взаимодействия скользящих дислокаций с дислокационными петлями // Электронный журнал: наука, техника и образование. 2016. №1 (5). С. 262-270. URL: <http://nto-journal.ru/uploads/articles/7009c7a4b743fafd3e70e73c2d1374aa.pdf> (дата обращения 18.04.2018)

журнал: наука, техника и образование. 2015. №4 (4). С. 121-131. URL: <http://nto-journal.ru/uploads/articles/c20c615d0d3d209dbdd26874a520be35.pdf> (дата обращения 4.04.2018)

3. Белов Ю.С., Маслов Е.В. ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛИЗМА В ЗАДАЧАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ // Электронный журнал: наука, техника и образование. 2017. №1 (10). С. 38-43. URL: <http://nto-journal.ru/uploads/articles/b708792ca25bce3ed136b9cbe62eb8f7.pdf> (дата обращения 22.04.2018)
4. Deng, B., M. Khafizov, D.H. Hurley, and S R. Phillpot, Kapitza resistance of Si/SiO₂ interface. *Journal of Applied Physics*, 2014. 115(8): p. 084910.
5. Hurley, D.H., M. Khafizov, and S.L. Shinde, Measurement of the Kapitza resistance across a bicrystal interface. *Journal of Applied Physics*, 2011. 109(8).
6. McGaughey, A.J.H. and A. Jain, Nanostructure thermal conductivity prediction by Monte Carlo sampling of phonon free paths. *Applied Physics Letters*, 2012. 100(6): p. 061911.
7. Pang, J.W.L., A. Chernatynskiy, B.C. Larson, W.J.L. Buyers, et al., Phonon density of states and anharmonicity of UO₂. *Physical Review B*, 2014. 89(11): p. 115132.
8. Tulenko, J.S., *Nuclear Reactor Materials and Fuels*. Nuclear Energy, 2013: p. 203-214.