

УДК 621.378.35

PACS number(s): 73.20.Dx, 85.42.+m

## РОЗРАХУНОК БАЛІСТИЧНО-КОНДУКТИВНОГО ПЕРЕНОСЕННЯ ТЕПЛА МЕТОДОМ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

**Л. Монастирський, Б. Соколовський, Я. Савула, Т. Мандзак,  
В. Якимів, Ю. Прокопів**

*Львівський національний університет імені Івана Франка  
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна*

За допомогою методу скінченних елементів із використанням експоненціальних апроксимацій базових функцій розраховано процес теплоперенесення у тонкій напівпровідниковій структурі. Розглянуто балістично-кондуктивну апроксимацію рівняння Больцмана. Наведено результати моделювання тепло перенесення для різних співвідношень товщини кремнієвої пластини та довжини вільного пробігу носіїв тепла.

*Ключові слова:* теплоперенос, метод скінченних елементів, рівняння Больцмана, напівпровідники.

Широке використання у сучасній електроніці напівпровідникових мікро- та наноструктур зумовлює необхідність адекватного моделювання явищ переносу в таких структурах, зокрема процесів перенесення тепла. У цьому відношенні значний інтерес набуває розробка точних чисельних моделей теплопереносу в мікро- чи нанорозмірних напівпровідникових приладах з метою їх прогнозування функціональних характеристик у широкому діапазоні споживаних потужностей. Такі моделі у випадку напівпровідникових структур з малими геометричними розмірами унаслідок прояву балістичного, тобто безрозсіювального, механізму теплопереносу не можуть базуватися на використанні рівняння Фур'є для теплового потоку  $q(r,t)$ :

$$q(r,t) = -k\nabla T(r,t), \quad (1)$$

де  $k$  – коефіцієнт теплопровідності,  $T$  – температура.

Обмеженість рівняння (1) полягає ще і в тому, що воно передбачає безмежну швидкість поширення тепла, що, очевидно, спричинює суттєві неточності в діапазоні дуже коротких часів, коли проявляється кінцева швидкість поширення тепла.

Найбільш адекватно процес поширення тепла може бути описаний рівнянням Больцмана:

$$\frac{\partial f(r, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (2)$$

де  $f$  та  $f_0$  – рівноважна та нерівноважна функції розподілу носіїв тепла (фононів, електронів),  $\vec{v}$  – їх групова швидкість,  $\tau$  – час релаксації носіїв тепла, який загалом

залежить від частоти (енергії) носіїв тепла, а також від хвильового вектора (напряму поширення тепла).

Однак розв'язання рівняння Больцмана наштовхується на значні обчислювальні труднощі, що зумовлено наявністю в ньому семи незалежних змінних. Щоб спростити розрахунки у статті [1] було запропоновано дифузійно-кондуктивне рівняння, яке отримане з рівняння Больцмана у разі представлення нерівноважної функції розподілу у вигляді суми двох функцій  $f_b$  та  $f_m$ , відповідно пов'язаних з балістичним та розсіювальним процесами. Балістичну компоненту функції розподілу  $f_b$  визначають процесами на границі структури і вона не підлягає зміні в об'ємі напівпровідника внаслідок розсіювання, водночас у дифузійній компоненті функції розподілу  $f_m$  відображаються процеси розсіювання всередині структури.

Із рівняння Больцмана одержуємо такі рівняння для функцій  $f_m$  та  $f_b$ :

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f_m = -\frac{f_m - f_0}{\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{|\vec{v}|} \frac{\partial f_b}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla f_b = -\frac{f_b}{|\vec{v}| \tau}, \quad (4)$$

де  $\tau$  – час релаксації носіїв тепла,  $\vec{\Omega}$  – одиничний вектор, який задає напрям поширення носіїв тепла.

Легко бачити, що рівняння (4) можна розв'язати аналітично

$$f_b(t, \vec{r}, \vec{\Omega}) = f_w \left[ t - (s - s_0) / |\vec{v}|, \vec{r} - (s - s_0) \vec{\Omega} \right] \times \exp \left( -\int_{s_0}^s \frac{ds}{|\vec{v}| \tau} \right), \quad (5)$$

де  $f_w$  – значення функції розподілу в граничній точці  $s_0$ , що відповідає напрямку  $\vec{\Omega}$  (зазначимо, що  $f_w$  охоплює як ті носії, що генеруються на границі, так і ті, що розсіюються від неї),  $s - s_0$  – відстань вздовж напрямку поширення носіїв тепла.

Розкладаючи локальну температуру, внутрішню енергію та тепловий потік на балістичні та кондуктивні компоненти, можна в результаті для випадку одномірної задачі отримати таке рівняння для внутрішньої енергії ( $u = u_b + u_m$ ) [2]

$$\tau \frac{\partial^2 u_m}{\partial t^2} + \frac{\partial u_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u_m}{\partial x} - u_m \right) - \frac{\partial q_b}{\partial x}, \quad (6)$$

з початковими

$$t = 0, \quad u(x, 0) = u_m(x, 0) + u_b(x, 0) = CT_0, \\ \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \quad (7)$$

та крайовими умовами

$$x = 0, \quad \left( \tau \frac{\partial u_m}{\partial t} + u_m \right) \Big|_{x=0} = \frac{2\Lambda}{3} \left( \frac{\partial u_m}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} \quad (8)$$

$$x = L, \quad \left( \tau \frac{\partial u_m}{\partial t} + u_m \right) \Big|_{x=L} = -\frac{2\Lambda}{3} \left( \frac{\partial u_m}{\partial x} \right) \Big|_{x=L}, \quad (9)$$

де  $C$  – питома теплоємність,  $\Lambda = |\vec{v}| \tau$  – довжина вільного пробігу носіїв тепла,  $L$  – товщина напівпровідникової пластини. Під час розрахунків час вільного пробігу становить  $5 \cdot 10^{-11}$  с, а довжину вільного пробігу вибирали  $6 \cdot 10^{-8}$  м.

Балістичні складові теплового потоку  $q_b$  та внутрішньої енергії пластини  $u_b$  з урахуванням (5) виражаються за допомогою формул:

$$u_b(x, t) = \begin{cases} \frac{C\Delta T}{2} \int_{\mu_t}^1 e^{-(x/\mu \Lambda)} d\mu + u_{b0}(x, 0), & 0 \leq \mu_t = x/(vt) \leq 1, \\ u_{b0}(x, 0), & \text{інші } \mu_t, \end{cases} \quad (10)$$

$$q_b(x, t) = \begin{cases} -\frac{Cv\Delta T}{2} \int_{\mu_t}^1 \mu e^{-(x/\mu \Lambda)} d\mu + q_{b0}(x, 0), & 0 \leq \mu_t \leq 1, \\ q_{b0}(x, 0), & \text{інші } \mu_t, \end{cases} \quad (11)$$

$$u_{b0}(x, 0) = \frac{CT_0}{2} \left\{ E_2\left(\frac{x}{\Lambda}\right) + E_2\left(\frac{L-x}{\Lambda}\right) \right\}, \quad (12)$$

$$q_{b0}(x, 0) = \frac{Cv}{2} \left\{ E_3\left(\frac{x}{\Lambda}\right) - E_3\left(\frac{L-x}{\Lambda}\right) \right\}, \quad (13)$$

де  $E_n(a) = \int_1^{\infty} x^{-n} e^{-ax} dx$  – інтегральна показникова функція порядку  $n$ .

Перейдемо до безрозмірних величин: часу –  $t^* = t/\tau$ , координати –  $\eta = x/L$ , внутрішніх енергій –  $\theta_m = (u_m - u_{m0})/C\Delta T$ ,  $\theta_b = (u_b - u_{b0})/C\Delta T$ ,  $\theta = (u - u_0)/C\Delta T$ , теплових потоків –  $q_m^* = (q_m - q_{m0})/Cv\Delta T$ ,  $q_b^* = (q_b - q_{b0})/Cv\Delta T$ ,  $q^* = (q - q_0)/Cv\Delta T$ .

Розглядаючи далі найактуальніший випадок не дуже малих часів, коли можна знехтувати другою похідною за часом у рівнянні (6) та першою похідною в крайових умовах (8) і (9), одержимо таку початково-крайову задачу:

$$\frac{\partial \theta_m}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{Kn^2}{3} \frac{\partial \theta_m}{\partial \eta} - Pe \cdot \theta_m \right) - Kn \frac{\partial q_b^*}{\partial \eta}, \quad (14)$$

$$t^* = 0, \quad \theta_m(\eta, 0) = 0, \quad (15)$$

$$\eta = 0, \quad \theta_m|_{\eta=0} = \frac{2Kn}{3} \left( \frac{\partial \theta_m}{\partial \eta} \right), \quad (16)$$

$$\eta = 1, \quad \theta_m|_{\eta=1} = -\frac{2Kn}{3} \left( \frac{\partial \theta_m}{\partial \eta} \right), \quad (17)$$

де  $Kn = \Lambda/L$  – число Кнудсена. З метою врахування такого механізму тепло переносу, як фононне захоплення в рівняння, (14) введено "дрейфову складову", величина якої задається безрозмірним коефіцієнтом Пекле  $Pe$ .

Початково-крайову задачу [14–17] для балістично-кондуктивного рівняння розв'язували методом скінченних елементів [3, 4]. При використанні цього методу шукана функція  $\theta_m$  апроксимується дискретною функцією на множині кусково-неперервних функцій, визначених на скінченному числі  $n$  підобластей (елементів)

$D_k = \{\eta \mid \eta_k < \eta < \eta_{k+1}\}$ . Функція  $\theta_m$  задовольняє варіаційне рівняння, яке легко отримується із (14):

$$\int_0^1 \frac{\partial \theta_m}{\partial t^*} v d\eta = - \int_0^1 \left( \frac{Kn^2}{3} \frac{d\theta_m}{d\eta} - Pe\theta_m \right) \frac{dv}{d\eta} d\eta + \left( \left( \frac{Kn^2}{3} \frac{d\theta_m}{d\eta} - Pe\theta_m \right) v \right)_0^1 - \int_0^L Kn \frac{dq_b^*}{d\eta} v d\eta, \quad (18)$$

де  $v(t^*, \eta)$  – довільна неперервна функція.

Функції  $\theta_m(t^*, \eta)$  та  $v(t^*, \eta)$  виразимо через базові функції  $N_i(\eta)$ :

$$\theta_m(t^*, \eta) = \sum_{i=1}^{n+1} u_i^k(t^*) N_i(\eta), \quad (19)$$

$$v(t^*, \eta) = \sum_{i=1}^{n+1} v_i^k(t^*) N_i(\eta), \quad (20)$$

де  $u_i^k(t^*)$  є шуканими значеннями невідомої функції у вузлових точках. Очевидно, для цього необхідно, щоб виконувались умови:

$$\begin{aligned} N_i(\eta_i) &= 1, \\ N_i(\eta_j) &= 0 \text{ при } i \neq j. \end{aligned} \quad (21)$$

Найпростіший вигляд функцій  $N_i(\eta)$  отримуємо при застосуванні кусково-лінійних апроксимацій. Однак для таких функцій у разі великих чисел Пекле (переважання адвекції) часто не досягається збіжність розрахунків. Тому в цій роботі використано експоненціальні апроксимації базових функцій [5], які вибирались з умови забезпечення постійності потоку тепла на кожному скінченному елементі. Такі базові функції задовольняють рівняння:

$$\frac{d}{d\eta} \left( \frac{Kn^2}{3} \frac{dN_i(\eta)}{d\eta} - Pe \cdot N_i(\eta) \right) = 0 \text{ при } \eta_{i-1} < \eta < \eta_i, \quad (22)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left( \frac{Kn^2}{3} \frac{dN_i(\eta)}{d\eta} + Pe \cdot N_i(\eta) \right) = 0 \text{ при } \eta_i < \eta < \eta_{i+1}. \quad (23)$$

Підставивши (19) та (20) у (18) та скоротивши на  $v_i^k(t^*)$ , отримаємо задачу Коші:

$$\begin{aligned} AU'(t^*) &= BU(t^*) + C(t^*), \\ U(0) &= 0 \text{ при } t^* = 0, \end{aligned} \quad (24)$$

де  $U$  – вектор-стовпчик із значень невідомої функції у вузлових точках,  $A$ ,  $B$  – квадратні матриці розрідженої (стрічкової) форми,  $C$  – вектор-стовпчик, елементи яких залежать від значень балістичного потоку у вузлових точках.

Розрахунки проводились для різних товщин кремнієвої пластини як за відсутності (рис. 1, 2), так і наявності адвекції (рис. 3).

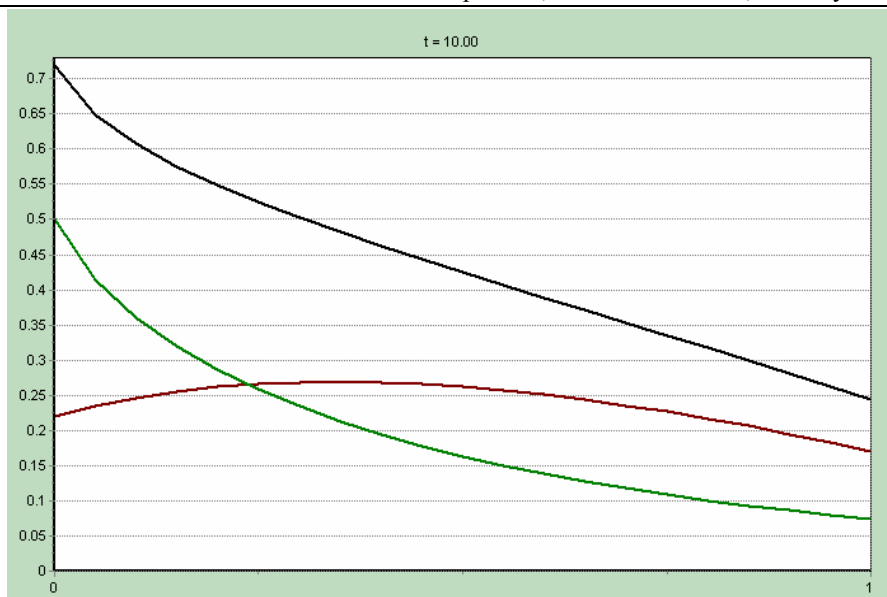


Рис. 1. Координатний розподіл внутрішньої енергії (суцільна крива) при  $t^* = 10$  для випадку  $Kn = 1$ ,  $Pe = 0$ . Пунктирна крива – кондуктивна складова, штрих-пунктирна крива – балістична складова



Рис. 2. Координатний розподіл внутрішньої енергії (суцільна крива) при  $t^* = 10$  для випадку  $Kn = 10$ ,  $Pe = 0$ . Пунктирна крива – кондуктивна складова, штрих-пунктирна крива – балістична складова

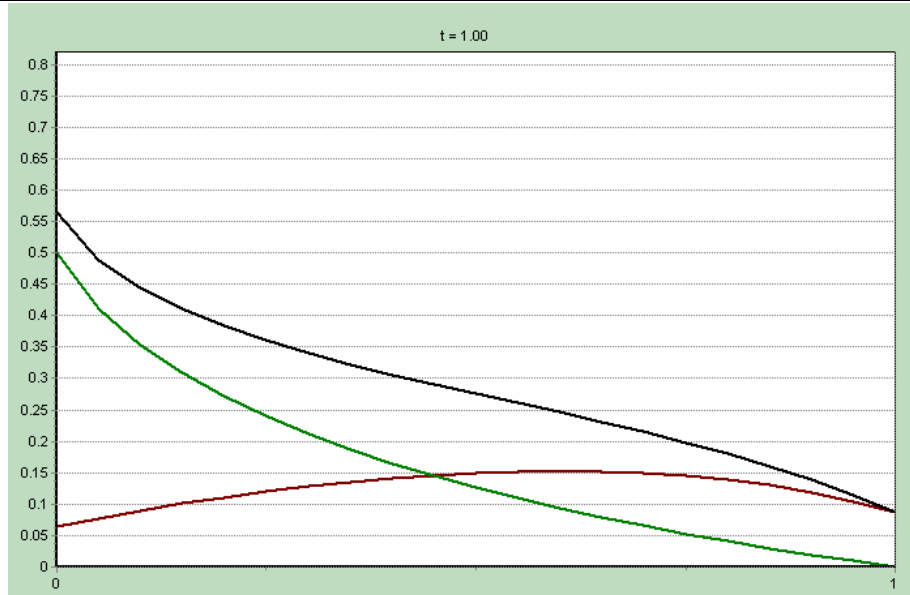


Рис. 3. Координатний розподіл внутрішньої енергії (суцільна крива) при  $t^* = 1$  для випадку  $Kn = 1$ ,  $Pe = 1$ . Пунктирна крива – кондуктивна складова, штрихпунктирна крива – балістична складова

Як бачимо з показаних рисунків, у разі зменшення товщини напівпровідникової пластини зростає роль балістичного перенесення тепла. Він суттєво проявляється навіть у випадку, коли товщина зразка на порядок перевищує довжину вільного пробігу носіїв тепла. Простежено також вплив ефекту затягування фононів на формування профілю температури зразка.

1. *Gang Chen*. Ballistic-Diffusive Conduction Equations. *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86. P. 2297–2300.
2. *Gang Chen*. Ballistic-Diffusive Equations for Transient Heat Conduction From Nano to Macroscales, *Transactions of ASME*, 2002. Vol. 124. P. 320–328.
3. *Савула Я. Г.* Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами, Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. І. Франка, 2004. 221 с.
4. *Szabo B. A., Babushka I.* Finite Element analysis, John Wiley and Sons, New York, 1991. 368 p.
5. *Song Wang*. A Novel Exponentially Fitted Triangular Finite Element Method for an Advection-Diffusion Problem with Boundary Layers // *Journal of Computational Physics*, 1997. Vol. 134. P. 253–260.

**CALCULATION OF BALLISTIC-CONDUCTIVE HEAT TRANSFER BY  
FINITE ELEMENT METHOD****L. Monastyrsky, B. Sokolovsky, Ya. Savula, T. Mandzak, V. Yakymiv,  
Yu. Prokopiv***Ivan Franko L'viv National University,  
Dragomanova, 50, L'viv, Ukraine*

It has been carried out calculation of heat transfer in thin semiconductor structure by means of finite element method with using exponential approximations of basic functions. Ballistic-conductive approximation of the Boltzmann equation is considered. The results of modeling of heat transfer for different ratio of silicon plate's thickness to free path of heat carriers are presented.

*Key words:* heat transfer, finite element method, Boltzmann equation, semiconductors.

Стаття надійшла до редколегії 25.01.2008

Прийнята до друку 08.07.2008