

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, τ – 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 τ – 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 θ_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 θ_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).

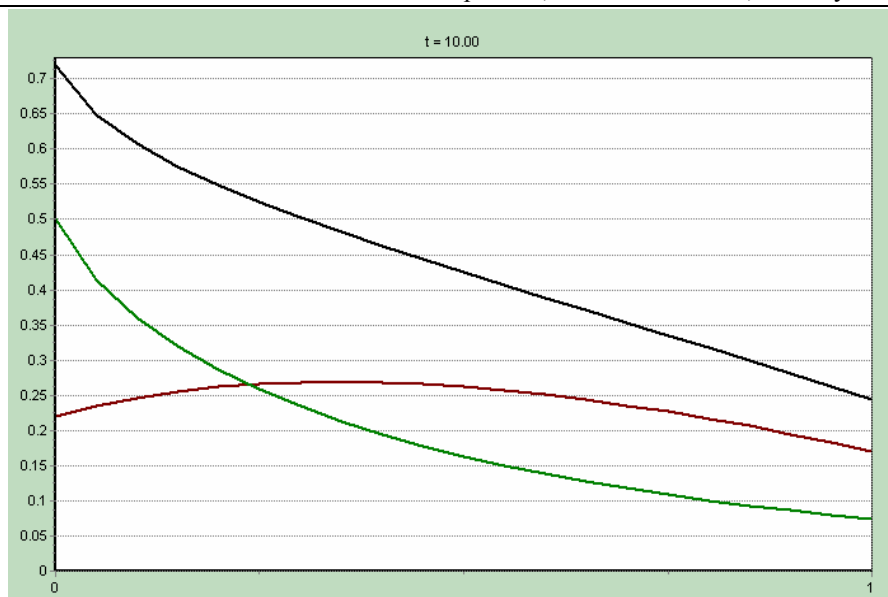


Рис. 1. Координатний розподіл внутрішньої енергії (суцільна крива) при $t^* = 10$ для випадку $Kn = 1$, $Pe = 0$. Пунктирна крива – кондуктивна складова, штрих-пунктирна крива – балістична складова



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

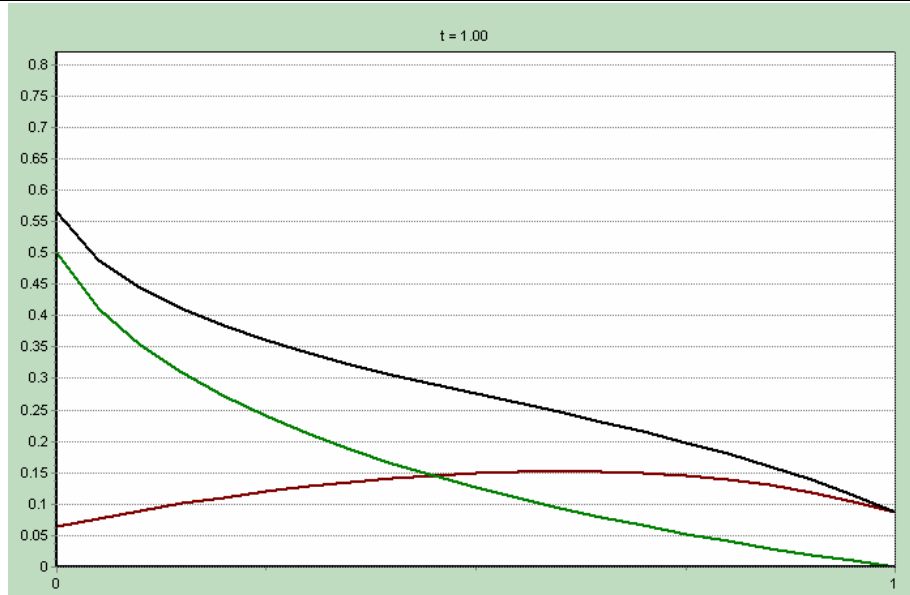


Рис. 3. Координатний розподіл внутрішньої енергії (суцільна крива) при $t^* = 1$ для випадку $Kn = 1$, $Pe = 1$. Пунктирна крива – кондуктивна складова, штрихпунктирна крива – балістична складова

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