

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

Тепловые проблемы наноэлектроники

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 4032 группы

направления 03.03.03 «Радиофизика»
код и наименование направления

Института физики

наименование факультета

Романова Александра Дмитриевича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

И.А. Ермолаев

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2022 г.

В последние годы разрабатывается всё больше различных вычислительных и электронных устройств на основе полупроводниковых микро- и нано- компонент. Пик развития полупроводниковых элементов для вычислений пришёлся на конец 20 и начало 21 века. Технологический процесс производства полупроводников постоянно становился всё меньше, в итоге, удалось достигнуть практически пика в размерах микротранзисторов, а именно в 3 нанометра. Поскольку, для того, чтобы увеличить вычислительную способность процессоров, необходимо увеличивать количество микротранзисторов в процессоре или микросхеме, а самый эффективный метод достичь этого, это внедрять новые технологии в производство, благодаря которым можно уменьшать физический размер этих самых микротранзисторов. Но в связи с этим, возникает множество новых проблем, которые связаны с квантовой физикой и распределением тепла

Одной из первых работ по теории тепла является работе Жозефа Фурье "Аналитическая теория тепла", в которой он заложил аналитическую основу для всех работ по теплопередаче вплоть до сегодняшнего дня. Наиболее важный вывод из этой работы сформулирована в виде закона Фурье [1.2]

Где \vec{q} - тепловой поток, κ - теплопроводность, а T - температура.

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T$$

Этот закон утверждает, что тепло течёт в направлении, противоположном градиенту температуры, и связь между ними линейна с константой пропорциональности κ . После публикации этой работы было проведено много экспериментальных работ по определению теплопроводности различных видов материалов[1.2]

Хотя количественное понимание теплового потока было разработано уже давно, вопрос о том, что переносит тепло и что ограничивает тепловой поток, по-прежнему широко изучается. В твёрдом теле тепло переносится двумя различными частицами, электронами и атомами, или, точнее, коллективными колебаниями атомов, известными как фононы. Теплопроводность электронов напрямую связана с электропроводностью через закон Видеманна-Франца

Где σ - электропроводность, L - константа пропорциональности, известная как число Лоренца, а T - температура.

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

Качественное понимание и количественную оценку теплопроводности в твёрдых телах можно получить на основе выражения из кинетической теории газов. Используя эти уравнения, можно сформулировать коэффициент для фононной части теплопроводности любого материала

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v v \Lambda$$

Коэффициент для фононной части теплопроводности

Где C_U - объёмная (фононная) удельная теплота, U - скорость звука в этих материалах, а Λ - средний свободный путь фононов. При хорошем описании удельного тепла и скорости звука понимание теплопроводности зависит от описания среднего свободного пробега этих фононов.[2]

Баллистический перенос фононов

В законе Фурье тепловой поток пропорционален градиенту температуры. Однако в этой модели неявно предполагается, что перенос является диффузионным, что подразумевает, что фононы имеют средний свободный путь намного меньше размеров образца и рассеиваются достаточно, чтобы создать этот градиент. При баллистическом переносе средний свободный путь фононов намного длиннее, чем масштаб устройства. В этом случае фононы распространяются между тепловыми резервуарами, не рассеиваясь, и, таким образом, закон Фурье нарушается. Это хорошо известный эффект для электронов, но недавно он был замечен и для фононов в более низких измерениях. Это может иметь возможные последствия для систем, где желательна высокая теплопроводность, например, для охлаждения интегральных схем или полупроводниковых лазеров, или даже для создания фононного волновода, где фононы могут быть использованы в качестве средства связи или для тестирования определённых квантовых эффектов. Кроме того, это имеет фундаментальный интерес, например, квант теплопроводности был измерен в одномерном баллистическом канале.

Баллистический перенос был достигнут несколькими способами, включая переход к конкретному материалу, такому как углеродные нанотрубки, или путём фильтрации коротковолновых фононов. Когда длинноволновые фононы являются доминирующим теплоносителем, рассеяние Умклаппа подавляется. При использовании чистых материалов рассеяние примесей также может быть значительно уменьшено. Таким образом, средний

свободный путь может стать длиннее, чем масштаб системы. Было предложено и даже продемонстрировано несколько способов отфильтровать эти коротковолновые фононы[3.4.5.6]

Введение в температурные проблемы

Ясно, что потребление энергии и отвод тепла в современных интегральных схемах с нанометровым размером транзисторов является актуальной задачей. Переход электронной промышленности на многоядерные конструкции, в которых рост производительности достигается не за счёт увеличения тактовой частоты, а за счёт увеличения числа процессоров, помог снять некоторые тепловые проблемы, но не решил проблему неравномерности распределения тепла внутри компьютерного чипа.

Последнее приводит к появлению горячих точек с тепловым потоком, превышающим ~ 500 Вт/см². Практические проблемы, связанные с повышенной плотностью рассеиваемой мощности, возникли также в оптоэлектронных и фотонных устройствах. Тепловые проблемы усложняются тем, что способность материала проводить тепло ухудшается, когда он структурируется на нанометровом уровне. По этим причинам тепловое управление должно быть улучшено не только на уровне корпуса, но и на уровне наноразмерных материалов и устройств[6.7].

• Формализм Ландауэра.

Формализм Ландауэра был первоначально сформулирован для связи электрического сопротивления квантового проводника с рассеивающими свойствами этого проводника. Формализм описывает проводимость квантового проводника как сумму проводимостей всех квантовых каналов в проводнике, предполагая отсутствие связи между каналами.

Проводимость каждого канала моделируется через пропускную способность. Эта пропускная способность содержит всю информацию различных каналов. В итоге полный ток представляет собой разность между током в одном направлении минус ток в другом направлении. Поскольку предполагается, что пропускная способность одинакова для обоих направлений, эта разница возникает из-за различия в распределении по обе стороны проводника.

Именно поэтому формализм Ландауэра применяется, в частности, для моделирования баллистического переноса, в этом случае контакты являются движущей силой проводимости, и предположение о том, что каналы проводимости не взаимодействуют, также справедливо. Однако была проведена работа по применению формализма Ландауэра и к случаям без баллистического транспорта. Хотя формализм Ландауэра был первоначально написан для электропроводности, он может быть применён и к фононной проводимости. Формулу для теплопроводности, использующая модель Ландауэра, которую можно увидеть на

$$G = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^{\omega_D} T(\omega) \frac{\hbar^3 \omega^2}{k_B T^2} \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} d\omega$$

Модель Ландауэра.

Суммирование по каналам, заменено интегралом, а $T(\omega)$ - пропускная функция, которая содержит плотность каналов на частоте ω с их вероятностью передачи. Последний коэффициент получается из производной распределения Бозе-Эйнштейна для фононов. Все процессы рассеяния теперь описываются в сквозном виде. [7.8]

Однако, поскольку предположения, сделанные для оригинальной формулировки Ландауэра, справедливы и для формулировки для фононной проводимости, процессы дефазировки, такие как умклапповское рассеяние, обычно не учитываются, хотя существуют поправки, в которых подходящая пропускная функция для описания умклапповского рассеяния определяется на основе подгонки объёмных экспериментальных данных. Для целей настоящего исследования предполагается, что система значительно меньше среднего свободного пробега фононов и поэтому в ней сильно преобладает граничное рассеяние. В этом случае оправдано не учитывать рассеяние Умклаппа.[9.10]

• Метод Грина-Кубо.

Формулы Грина — Кубо или соотношения Грина — Кубо связывают кинетические коэффициенты (коэффициенты переноса) линейных диссипативных процессов с временными корреляционными функциями соответствующих потоков [Формулы Грина — Кубо или соотношения Грина — Кубо https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A4%D0%BE%D1%80%D0%BC%D1%83%D0%BB%D1%8B_%D0%93%D1%80%D0%B8%D0%BD%D0%B0_%E2%80%94%D0%9A%D1%83%D0%B1%D0%BE].

Названы по именам Мелвилла Грина (англ.)рус., установившем их в 1952—1954 годах на основе теории марковских процессов, и Риого Кубо, установившем их в 1957 году с помощью теории реакции статистической системы на внешние возмущения.

Иногда формулы Грина — Кубо называют формулами Кубо. При этом существуют отдельные формулы Кубо, являющиеся частным случаем формул Грина — Кубо.

Формулы Грина — Кубо применимы к газам, жидкостям и твёрдым телам как для классически, так и для квантовых систем. Они являются одним из наиболее важных результатов статистической теории необратимых процессов.

Метод Грина-Кубо является равновесным методом, он не страдает от этих ограничений. Соотношение Грина-Кубо, связывает корреляцию теплового потока J с теплопроводностью через формулу, показанную на «Рисунок 2.6»

$$\kappa = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{k_B T^2 L^d} \int_0^\tau dt \langle J(t) J(0) \rangle \quad 5$$

Соотношение Грина-Кубо[12]

Где k_B - постоянная Больцмана, T - температура L - длина системы и d - размерность. Другими словами, теплопроводность пропорциональна усреднённой временной корреляции теплового потока. Это уравнение решается в условиях равновесия, то есть без градиента температуры. Хотя уравнение определено для бесконечной длины, было обнаружено, что за пределами длины в несколько элементарных ячеек зависимость от длины пренебрежимо мала. Поэтому метод Грина-Кубо обычно может быть применён к гораздо меньшей ячейке моделирования. Типичное равновесное моделирование молекулярной динамики состоит из трёх этапов, два из которых непосредственно связаны с молекулярно динамическим моделированием, но после завершения моделирования требуется этап постобработки для извлечения теплопроводности.

Два этапа молекулярной динамики состоят из уравнивания и расчёта тепловых потоков и их корреляции. Корреляция выполняется с помощью специальной функции из пакета программного комплекса LAMMPS, которая вычисляет корреляцию и усредняет её для каждого определённого числа временных шагов. Функция корреляции будет медленно сходиться к нулю при увеличении времени. Поэтому можно выбрать конечное время корреляции, в симуляциях, выполненных для данной диссертации, использовалось время корреляции 750ps.

На последнем этапе обработки данных вычисляется интеграл и выполняется нормализация. Если решётка состоит из двух различных типов атомов, как в случае с полупроводниками, применяется фильтр Фурье, чтобы отфильтровать высокочастотные оптические компоненты, возникающие из-за колебаний между двумя типами атомов, поскольку было показано, что они почти не вносят вклад в тепловой поток. Типичная сходимость для моделирования с использованием метода Грина-Кубо.

Данный способ вносит некоторые неточности из-за эффекта конечного размера и эффекта контакта, но когда необходимо изучить систему конечного размера, это уже накладывает ограничения на ячейку моделирования, и в этом случае его будет работать гораздо быстрее.

СПОСОБЫ ОХЛАЖДЕНИЯ И ТЕРМОСТАБИЛИЗАЦИИ НАНОЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ.

Проблемы :

- переход на малоразмерные компоненты
- усиление интеграции и развитие архитектуры цифровых устройств
- использование наноконструкт и наноструктур (нанопроволоки, нанотрубки, графен и другие двумерные кристаллы, наноконструкты и т.п)
- увеличение плотности мощности энерговыделения в элементах устройств (процессоры, элементы памяти, элементы питания и т.п.)

- увеличение диссипации тепла во все более малых масштабах и рост плотности тепловыделения до 100-200 МВт/м²

Основные способы

Правильное расположение всех элементов печатной платы поможет избежать их перегрева, а в следствие и износа. Рассчитать правильную постановку элементов, в зависимости от их тепловыделения можно путём моделирования в программах, которые на основе физических законов способны смоделировать поведение той или иной конструкции в зависимости от их характеристик.

Так же необходимо правильно подбирать конструкции охлаждения для всех элементов и внедрять новые технологии теплопереноса и микро-архитектуры электронных компонентов, так же может помочь и внедрение новых, более термостойчивых материалов при производстве деталей.[8.9]

Активное охлаждение

Ещё одним из способов утилизации выделяемой оборудованием теплоты является применение различного рода теплообменников, которые представляют собой специальные конструкции для обмена тепловой энергией между любыми теплоносителями (жидкости, газы). Теплота, согласно законам термодинамики, всегда передаётся к более холодному стоку. Теплообменники применяют в энергетической, нефтеперерабатывающей, химической, газодобывающей и других отраслях промышленности.

Конкретный вид теплообменника определяется как некий компромисс между его функциональным назначением и экономическими показателями.

Основным элементом теплообменника является тепловая труба, которая представляет собой герметичное теплопередающее устройство, работающее по замкнутому испарительно-конденсационному циклу в контакте с внешними источником и приёмником теплоты.

В настоящее время это самые эффективные устройства для передачи тепловой энергии. Отношение плотности передаваемого через них теплового потока к падению температуры на единицу длины трубы в десятки тысяч раз больше, чем теплопроводность меди или серебра.

Существует множество конструкций тепловых труб. При этом общим для них является наличие трёх зон:

- Подвода теплоты — испаритель (именно здесь происходит поглощение теплоты и переход теплоносителя в паровую фазу);
- Транспортировки (собственно сама тепловая труба, внутри которой водном

направлении движется пар, в другом — конденсат);

- Отвода теплоты — конденсатор (её задача обеспечить конденсацию паровой фазы и передать (рассеять) полученную при этом теплоту окружающему пространству).[13.14.15.16]

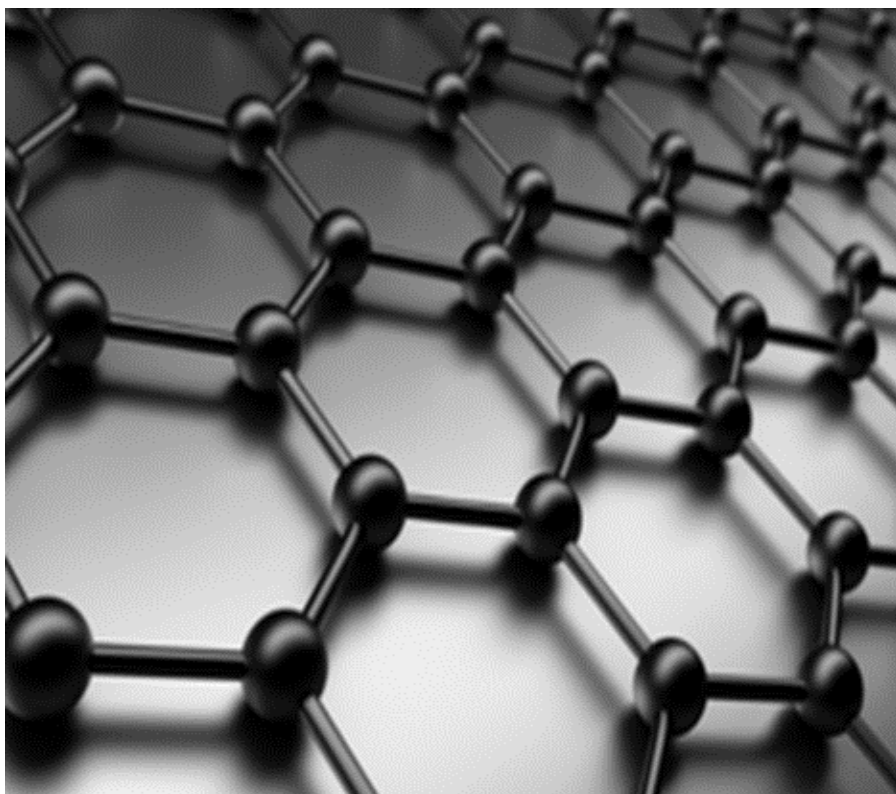
Графен (Фуллерен), как материал для терморегулирования

Фуллерен - молекулярное соединение, представляющее собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из трёхкоординированных атомов углерода. Своим названием фуллерены обязаны инженеру и архитектору Ричарду Бакминстеру Фуллеру, чьи геодезические конструкции построены по этому принципу. Первоначально данный класс соединений был ограничен лишь структурами, включающими только пяти- и шестиугольные грани.

Графен - это аллотроп углерода, состоящий из отдельных атомных плоскостей sp^2 -связанных атомов. Обычный объёмный графит состоит из графеновых плоскостей, связанных слабыми ван-дер-ваальсовыми силами. В 2004 году графен был механически отшелушен исследовательской группой из Манчестерского университета, Великобритания, и Института микроэлектронных технологий.

Графен демонстрирует чрезвычайно высокую подвижность электронов при комнатной температуре и скорость насыщения. Эти превосходные электронные свойства означают, что графен может быть потенциально использован для межсоединений и высокочастотных аналоговых коммуникационных устройств. Оптическая прозрачность графена в сочетании с высокой электропроводностью может быть использована в прозрачных электродах для фотоэлектрических солнечных батарей, гибкой электроники и сенсорных экранов.

Благодаря своей геометрии графен имеет ряд преимуществ по сравнению с углеродными нанотрубками. Плоскостная геометрия графена означает, что его гораздо легче обрабатывать на подложке, наносить рисунки, покрывать другими материалами, а также создавать электрические контакты. Несмотря на то, что графен сталкивается с рядом проблем, таких как разработка контролируемых процессов роста, качественных омических контактов, контроль краёв и пассивации интерфейса, его перспективы стать жизнеспособным электронным материалом выглядят вполне реальными.



Высокая теплопроводность графена открывает новые возможности практического его применения в терморегулировании нанoeлектроники. Даже если в конечном итоге в тепловых конструкциях будут использоваться не графен, а тонкие графитовые плёнки, обладающие высокой теплопроводностью ($\sim 2000 \text{ Вт/м}\times\text{К}$) по сравнению с кремнием ($\sim 145 \text{ Вт/м}\times\text{К}$). [17.18.19]

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе были рассмотрены тепловые проблемы нанoeлектроники, как практические, так и теоретические, и пути их решения, так же физика тепловых процессов на наномасштабах, особенности теплопереноса, различные квантовые эффекты.

Благодаря чему удалось составить эффективные методы теплопереноса в микроэлектронике для увеличения вычислительной мощности микрочипов и проводимости в полупроводниках.

Можно выделить следующие методы улучшения для теплопереноса в области микроэлектроники:

Правильное расположение всех элементов печатной платы поможет избежать их перегрева, а в следствие и износа. Рассчитать правильную постановку элементов, в зависимости от их тепловыделения можно путём моделирования в программах, которые на основе физических законов способны смоделировать поведение той или иной конструкции в

зависимости от их характеристик.

Так же необходимо правильно подбирать конструкции охлаждения для всех элементов и внедрять новые технологии теплопереноса и микро-архитектуры электронных компонентов, так же может помочь и внедрение новых, более термоустойчивых материалов при производстве деталей. [12.13]

Одним из подходов к решению проблемы самонагрева на уровне структуры устройства является включение в конструкцию чипа материалов с очень высокой теплопроводностью, то есть подход к управлению тепловым потоком. Эти теплопроводящие материалы могут быть использованы как для создания каналов устройства или межсоединений, так и в качестве распределителей тепла вместе с обычными электронными материалами. Также ожидается, что использование этих высокотеплопроводных материалов в качестве новых наполнителей позволит усовершенствовать термоинтерфейсные материалы.[20.21]

Применение графена в теплопроводящих конструкциях полупроводников, также позволяет значительно повысить эффективность теплопереноса, благодаря его высокой теплопроводности.

Теоретические проблемы тепло-переноса на нано уровне, представляют собой проблему описания данного процесса с точки зрения классической тепло физики, так как закон Фурье перестаёт работать при использовании нано масштабов.

Наилучшем вариантом решения данной проблемы является использование законов квантовой физики, в том числе, Формализма Ландауэра и метода Грина-Кубо, при расчётах теплораспределения в наноструктурах. Благодаря данным методам, становятся намного понятнее принципы переноса тепла и физика процессов на квантовом уровне, что крайне улучшает точность вычислений и может помочь решить уже практические проблемы переноса тепла в наноструктурах.

Решение задач связанных с теплораспределением в нанoeлектронике крайне важно для дальнейшего развития вычислительной техники, так как решение подобных задач способно значительно повысить эффективность созданных и новых технологий, а также, улучшение охлаждения нанoeлектронных компонентов позволит увеличить их срок службы, проводимость и даже понизить энергопотребление.[20.21.]

Изучение квантовых эффектов, также имеет высокую значимость в будущем развитии технологий по вычислениям и обработке информации, так как развитие в производстве всё более меньших по физическим размерам полупроводниковых транзисторов близится к своему пиковому значению, когда создавать уменьшение этих самых транзисторов уже будет невозможно.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. А. Шука «Нанoeлектроника» 2007 г. , 465 стр.
2. А.С Дмитриев «Введение в нанотеплофизику» 2020 г., 793 стр.
3. Ж. Б. Ж. Фурье, Аналитическая теория тепла Жозефа Фурье; перевод, с примечаниями, Александра Фримена; под ред. Cambridge [Eng.] :: University Press" переводное изд., 1878.
4. D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen, D. R. Clarke, S. Fan, K. E. Goodson, P. Keblinski, W. P. King, G. D. Mahan, A. Majumdar, H. J. Maris, S. R. Phillpot, E. Pop, and L. Shi, "Nanoscale thermal transport. II. 2003-2012," Обзоры по прикладной физике, том 1, с. 011305, март 2014. [11] Л. Вэй, П. К. Куо, Р. Л. Томас, Т. Р. Энтони и В. Ф. Банхольцер, "Теплопроводность изотопно модифицированного монокристалла алмаза", Physical Review Letters, наноструктурированных объемных сплавов висмут-сурьма-теллурид"
5. А.С. Дмитриев, И.А. Михайлова. Введение в наноэнергетику. М. Изд. МЭИ. 2011.
6. А. С. Дмитриев. Введение в нанотеплофизику. БИНОМ. Лаборатория знаний. Москва. 2015.
7. А. Einstein, "Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme," Annalen der Physik
8. А. С. Дмитриев. Теплофизические проблемы наноэнергетики. Часть 2. «Теплоэнергетика». № 4. 2011
9. А. С. Дмитриев. «Теплофизические проблемы наноэнергетики». Часть 1. «Теплоэнергетика». № 12. 2010
10. Дж. Джоуль, "ЛП. О теплотворном действии магнитоэлектричества и о механической ценности тепла", Философский журнал.
11. P. Debye, "Zur Theorie der spezifischen Wärmen," Annalen der Physik
12. Формулы Грина — Кубо или соотношения Грина — Кубо https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A4%D0%BE%D1%80%D0%BC%D1%83%D0%BB%D1%8B_%D0%93%D1%80%D0%B8%D0%BD%D0%B0_%E2%80%94%D0%9A%D1%83%D0%B1%D0%BE
13. Перенос теплоты в наноструктурах [Электронный ресурс]:

<https://cyberleninka.ru/article/n/perenos-teploty-v-nanostrukturah>

14. Теплопроводность [Электронный ресурс]:
https://en.wikipedia.org/wiki/Thermal_conduction

15. Л. Ши, "Тепловой и термоэлектрический перенос в наноструктурах и низкоразмерных системах", Наномасштабная и микромасштабная теплофизическая инженерия.

16. R. Franz and G. Wiedemann, "Ueber die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle," Annalen der Physik und Chemie

17. А.С. Дмитриев, И.А. Михайлова. Физико-химия наноструктур. М. Изд. МЭИ. 2012.

18. А.С. Дмитриев. Тепловые процессы в наноструктурах. М. Изд. МЭИ. 2012.

19. Дж. Зиман, Электроны и фононы: теория транспортных явлений в твердых телах. Кларендон Пресс, 1967.

20. Наноразмерная тепловизионная картина диссипации в квантовых системах [Электронный ресурс]:
https://www.nature.com/articles/nature19843?error=cookies_not_supported&code=8da147bd-82a7-49d1-bc86-22f308ec5324

21. Т. Н. Нарасимхан, "Теплопроводность в 19 веке"2018