

Микроскопический анализ переноса тепла в $I_1/N/I_2$ гетерогенных наноструктурах при низких температурах

А.И. Безуглый^{1,2}, В.А. Шкловский², Р.В. Вовк², И.В. Мироненко²

¹Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина
E-mail: bezuglyj@kipt.kharkov.ua

²Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина
E-mail: shklovskij@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 30 октября 2018 г., опубликована онлайн 26 марта 2019 г.

Представлен кинетический подход, в рамках которого аналитически рассмотрен поперечный перенос тепла через металлический слой, расположенный между двумя массивными диэлектриками. Вычислена эффективная поперечная теплопроводность такой слоистой системы при произвольном значении толщины металлического слоя и найдены толщины, при которых в теплопроводности проявляется размерный эффект. Поперечный теплоперенос анализируется также в рамках феноменологической двухтемпературной (2ТМ) модели, т.е. в терминах электронной и фононной температур. Сравнение результатов 2ТМ и микроскопического подхода позволяет выяснить условия, при которых часто используемый двухтемпературный подход не применим.

Ключевые слова: гетероструктуры, стационарный нагрев, фононный теплообмен, низкие температуры.

1. Введение

Перенос тепла через многослойные гетероструктуры весьма интересен как для прикладных целей, так и с чисто научной точки зрения. Так, например, проблема теплоотвода чрезвычайно важна в нанoeлектронике, где металлические или полупроводниковые слои используются в качестве элементов тонкопленочных полевых транзисторов [1,2]. Теплоперенос в двухслойных системах играет важную роль в спиновом эффекте Зеебека и, как следствие, во всей области спинтроники, которая активно развивается в последние годы [3,4]. Научный аспект проблемы теплопроводности многослойных систем состоит в том, что закон Фурье $\mathbf{Q} = -k\nabla T$, который связывает поток тепла с градиентом температуры, не может быть непосредственно применен для анализа теплопереноса в слоистых наноструктурах, где длина свободного пробега фононов больше или сравнима с толщинами слоев и где существенное влияние

на теплоперенос оказывают условия на границах смежных материалов*. Таким образом, для описания потоков тепла в наноструктурах требуется микроскопический подход, который, в частности, позволяет корректно учесть влияние межслоевых границ на теплопроводность многослойной гетероструктуры.

Теоретическое описание поперечной теплопроводности слоистых структур на основании уравнения Больцмана для фононной функции распределения проводилось ранее в основном в терминах фононной интенсивности, т.е. потока энергии фононов в заданном направлении. Такое описание обычно сопровождается неконтролируемым предположением, что все фононные моды имеют одно и то же время релаксации (см., например, [5–7]). Заметим, что для тонких слоев сама запись интеграла столкновений в приближении времени релаксации (τ -приближении) с зависящей от температуры равновесной функцией распределения не является обоснованной, так как фононную температуру слоя нельзя кор-

* Такой характер переноса тепла иногда называется кнудсеновским пределом, поскольку в этом случае велик параметр Кнудсена Kn , который определяется как отношение длины свободного пробега носителей тепла к наименьшему характерному размеру системы.

ректно ввести, если толщина слоя меньше или порядка длины свободного пробега фононов [8]. В ряде недавних работ (см., например, [9] и цитируемую там литературу) также используется τ -приближение, хотя и считается, что каждая фононная мода имеет свое время релаксации.

В настоящей статье представлен, на наш взгляд, более последовательный кинетический подход, не опирающийся на представление о фононной температуре и на τ -приближение. В рамках этого подхода рассмотрен поперечный перенос тепла через металлический слой, расположенный между двумя массивными диэлектриками, имеющими температуры T_H и T_B , причем $T_H > T_B$. Анализ поперечной теплопроводности слоистой гетероструктуры основан на кинетическом уравнении Больцмана для фононной функции распределения $N_{\mathbf{q}}$, а также на предположении, что электроны в пленке термализованы вследствие электрон-электронных соударений и имеют температуру T_e . Предполагается, что фононы взаимодействуют с электронами, но при описании электрон-фононного взаимодействия фононная температура не вводится. Поскольку перенос тепла через N/I -границу осуществляется фононами, в анализе важную роль играют приведенные в разд. 2 граничные условия для функции $N_{\mathbf{q}}$. Эти условия учитывают как отражение фононов от границ пленки, так и обмен фононами между пленкой и массивными обкладками с температурами T_H и T_B [10]. В дальнейшем температуры обкладок считаются достаточно низкими, вследствие чего, во-первых, электроны можно считать термализованными, во-вторых, пренебречь столкновениями фононов с дефектами решетки и друг с другом и, в-третьих, пренебречь процессами переброса при электрон-фононных столкновениях. Отметим, что относительная простота рассмотренной нами микроскопической модели дает возможность получить результаты в аналитической форме.

Отметим также, что если в наших расчетах положить частоту фонон-электронных столкновений равной нулю, то мы приходим к случаю диэлектрической (полупроводниковой) прослойки, где перенос тепла осуществляется только фононами. Толщина такой прослойки должна быть достаточно мала, так как мы не учитываем рассеяние фононов на дефектах решетки и фонон-фононные столкновения, полагая, что основным механизмом рассеяния фононов является их взаимодействие с границами. При выполнении этих условий (которые не являются очень жесткими при низких температурах) можно сравнить результаты настоящей статьи с результатами, полученными на основании подхода, в котором фононная теплопроводность рассматривается в терминах переноса лучистой энергии [5] (см. подробности в разд. 4).

Статья организована следующим образом. В разд. 2 представлен микроскопический подход к описанию переноса тепла в многослойной системе и вычислена по-

перечная эффективная теплопроводность слоистой гетероструктуры. В разд. 3 поперечный теплоперенос анализируется в рамках феноменологической двухтемпературной (2ТМ) модели, т.е. в терминах электронной и фононной температур. Сравнение результатов 2ТМ и микроскопического подхода позволяет выяснить условия, при которых применение феноменологического двухтемпературного подхода является оправданным. В последнем разд. 4 сформулированы основные выводы, а также дано сравнение результатов настоящей работы с результатами более ранних работ.

2. Кинетический подход к поперечному переносу тепла через $I_1/N/I_2$ гетероструктуру

В этом разделе будет рассмотрен поперечный перенос тепла в гетероструктурах, содержащих слой нормального металла. Хотя наш подход может быть применен к произвольным слоистым гетероструктурам, здесь мы рассмотрим относительно простую гетероструктуру, изображенную на рис. 1. Переходя к формулировке модели, предположим, что диэлектрик I_1 имеет темпе-

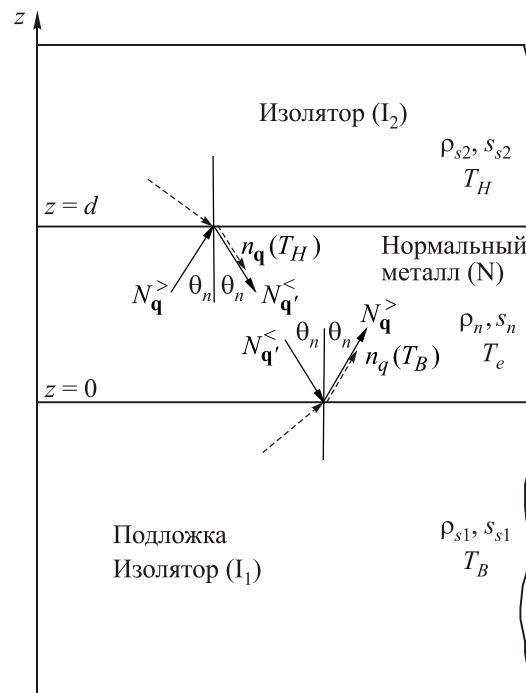


Рис. 1. Преломление и отражение фононных мод на границах сред в слоистой структуре $I_1/N/I_2$. Числа заполнения фононных состояний с волновыми векторами \mathbf{q} обозначены через $N_{\mathbf{q}}^{\lessgtr}$. Верхний индекс $>$ обозначает фононы с положительной z -компонентой вектора \mathbf{q} , а знак $<$ — фононы с отрицательной z -компонентой \mathbf{q} . Фононы, переходящие из диэлектрических слоев в N -слой, показаны штриховыми линиями. Буквами ρ и s обозначены плотности и скорости продольного звука соответствующих сред. Температура T_B — это температура массивной подложки, которая играет роль термостата, T_e — температура электронов, а T_H — температура верхней диэлектрической обкладки ($T_H > T_B$).

ратуру T_B , а температура диэлектрика I_2 равна T_H . Пусть при этом $T_H > T_B$. Фононный вклад в перенос тепла через гетероструктуру найдем в предположении, что электроны термализованы вследствие электрон-электронных столкновений и имеют температуру T_e .

Условием термализации электронной подсистемы является более высокая частота электрон-электронных столкновений по сравнению с частотой столкновений электронов с фононами. В области низких температур $T_e \ll \Theta_D$ для чистых металлов это условие выполняется, если $T_e \ll \Theta_D^2 / T_F$, где Θ_D — температура Дебая, а T_F — фермиевская температура. Оценки дают, что в чистых металлах электронная подсистема термализована при температурах порядка единиц кельвинов. В грязных металлах из-за усиления электрон-электронного и ослабления электрон-фононного взаимодействия условие термализации электронов выполняется при $T_e \lesssim 10$ К [11].

Чтобы вычислить поперечный поток тепла в рассматриваемой гетероструктуре, нужно найти функцию распределения для фононов в N-слое. Уравнение Больцмана для фононной функции распределения имеет вид

$$\pm s_{nz} \frac{dN_{\mathbf{q}}^{\lessgtr}}{dz} + v_{nq} N_{\mathbf{q}}^{\lessgtr} = v_{nq} n_q [T_e(z)], \quad (1)$$

где $n_q(T) = [\exp(\hbar\omega_q/T) - 1]^{-1}$, v_{nq} — частота столкновений продольных фононов с электронами (см. далее), а s_{nz} — проекция скорости фонона на ось z , которая направлена перпендикулярно к слоям. Обозначения $N_{\mathbf{q}}^{\lessgtr}$ поясняются в подписи к рис. 1.

Граничные условия при $z = 0$ и при $z = d$ имеют вид

$$N_{\mathbf{q}}^>(0) = \alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 N_{\mathbf{q}}^<(0), \quad (2)$$

$$N_{\mathbf{q}}^<(d) = \alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 N_{\mathbf{q}}^>(d). \quad (3)$$

Здесь $\alpha_{1(2)}$ и $\beta_{1(2)}$ — коэффициенты прохождения и отражения для границы I_1 / N (I_2 / N). В записи граничных условий волновые векторы \mathbf{q} и \mathbf{q}' представляют фононы, имеющие положительную или отрицательную z -компоненту волнового вектора: $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z > 0)$, $\mathbf{q}' = (q_x, q_y, -q_z)$.

Заметим, что условия (2) и (3) предполагают, что фононы, вылетевшие из слоя N в диэлектрик, назад уже не возвращаются. Такая картина характерна для монокристаллических диэлектриков с высокой теплопроводностью.

В модели акустического рассогласования [12–14] вероятность прохождения α зависит от угла падения фонона θ и акустических импедансов смежных сред $Z = \rho s$ и $Z' = \rho' s'$:

$$\alpha(\theta) = \frac{4ZZ' \cos \theta \cos \theta'}{(Z \cos \theta' + Z' \cos \theta)^2}. \quad (4)$$

Углы падения и преломления связаны соотношением $s' \sin \theta = s \sin \theta'$.

Уравнение для $N_{\mathbf{q}}^>(z)$,

$$\frac{dN_{\mathbf{q}}^>}{dz} + \frac{1}{l_n} N_{\mathbf{q}}^> = \frac{1}{l_n} n_q(T_e(z)) \quad (5)$$

имеет решение

$$N_{\mathbf{q}}^>(z) = C_{\mathbf{q}}^> e^{-z/l_n} + \int_0^z \frac{1}{l_n} e^{-(z-z')/l_n} n_q(T_e(z')) dz', \quad (6)$$

где длина свободного пробега фонона $l_n = |s_{nz}| / v_{nq}$. Решение уравнения для $N_{\mathbf{q}}^<(z)$ имеет следующий вид:

$$N_{\mathbf{q}}^<(z) = C_{\mathbf{q}}^< e^{z/l_n} + \int_z^d \frac{1}{l_n} e^{(z-z')/l_n} n_q(T_e(z')) dz'. \quad (7)$$

Входящие в (6) и (7) постоянные $C_{\mathbf{q}}^>$ и $C_{\mathbf{q}}^<$ определяются уравнениями, вытекающими из граничных условий. Подстановка (6) и (7) в (2) и (3) дает

$$C_{\mathbf{q}}^> - \beta_1 C_{\mathbf{q}}^< = \alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1, \quad (8)$$

$$C_{\mathbf{q}}^< \exp(d/l_n) - \beta_2 C_{\mathbf{q}}^> \exp(-d/l_n) = \alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2, \quad (9)$$

где

$$J_1 = \frac{1}{l_n} \int_0^d e^{-z'/l_n} n_q(T_e(z')) dz', \quad (10)$$

$$J_2 = \frac{1}{l_n} \int_0^d e^{-(d-z')/l_n} n_q(T_e(z')) dz'. \quad (11)$$

Заметим, что, если $d \gg l_n$, то в интеграл J_1 основной вклад вносит область $z' \lesssim l_n \ll d$, а в интеграл J_2 основной вклад вносит область $(d - z') \lesssim l_n \ll d$. Если же $d \ll l_n$, то фононы практически не взаимодействуют с электронами, и перенос тепла через тонкие N-слои имеет чисто фононную природу. При $d \ll l_n$ интегралы J_1 и J_2 малы, так как они имеют порядок d/l_n . Решение системы уравнений (8), (9) имеет вид

$$C_{\mathbf{q}}^< = \frac{1}{D} \left\{ \beta_2 \exp(-d/l_n) [\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1] + [\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2] \right\}, \quad (12)$$

$$C_{\mathbf{q}}^> = \frac{\beta_1}{D} [\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2] + \frac{\exp(d/l_n)}{D} [\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1], \quad (13)$$

где детерминант системы

$$D = \exp(d/l_n) - \beta_1 \beta_2 \exp(-d/l_n).$$

Подставив эти выражения в (6) и (7), для фононных функций распределения получаем

$$N_{\mathbf{q}}^{\gt}(z) = \frac{\exp(-z/l_n)}{D} \left\{ \beta_1 [\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2] + \exp(d/l_n) [\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1] \right\} + \int_0^z \frac{1}{l_n} e^{-(z-z')/l_n} n_q [T_e(z')] dz', \quad (14)$$

$$N_{\mathbf{q}}^{\lt}(z) = \frac{\exp(z/l_n)}{D} \left\{ \beta_2 \exp(-d/l_n) [\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1] + [\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2] \right\} + \int_z^d \frac{1}{l_n} e^{(z-z')/l_n} n_q [T_e(z')] dz'. \quad (15)$$

Уравнением для $T_e(z)$ может служить условие независимости теплового потока от координаты z :

$$Q_z = -k_e [T_e(z)] \frac{dT_e}{dz} + \int_{q_z > 0} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_q s_{nz} [N_{\mathbf{q}}^{\gt}(z) - N_{\mathbf{q}}^{\lt}(z)]. \quad (16)$$

Здесь второе слагаемое в правой части — это доля потока тепла, переносимая фононами. Видно, что подстановка выражений (14) и (15) в (16) дает интегро-дифференциальное уравнение для $T_e(z)$.

Ниже значительное внимание уделено пределу $d \gg l_n$, когда $D \approx \exp(d/l_n)$, поскольку именно в этом пределе электроны дают существенный вклад в перенос тепла через I₁/N/I₂ гетероструктуру. Отметим, что вы-

числение J_1 пренебрегает членами порядка $\frac{d^2 T_e}{dz^2} |_{z=0}$, а слагаемое пропорциональное dT_e/dz выпадает, так как

$$\frac{dT_e}{dz} |_{z=0} = 0.$$

В результате имеем $J_1 \approx n_q(T_e(0))$, и аналогично $J_2 \approx n_q(T_e(d))$.

Фононная функция распределения при $d \gg l_n$:

$$N_{\mathbf{q}}^{\gt}(z) = \frac{e^{-z/l_n}}{D} \left\{ \beta_1 [\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 J_2] + e^{d/l_n} [\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 J_1] \right\} + \int_0^z \frac{1}{l_n} e^{-(z-z')/l_n} n_q(T_e(z')) dz'. \quad (17)$$

Разложение $T_e(z')$ по малому градиенту температуры имеет вид

$$T_e(z') = T_e(z) + T_e(z') - T_e(z) = T_e(z) + \frac{dT_e}{dz} |_z (z - z').$$

Подстановка этого разложения в (17) дает

$$N_{\mathbf{q}}^{\gt}(z) = e^{-z/l_n} \left[\alpha_1 n_q(T_B) + \beta_1 n_q(T_e(0)) \right] + n_q(T_e(z)) - \frac{dn_q}{dT_e} \frac{dT_e}{dz} l_n - n_q(T_e(z)) e^{-z/l_n} + \frac{dn_q}{dT_e} \frac{dT_e}{dz} \left(1 + \frac{z}{l_n} \right) e^{-z/l_n} l_n; \quad (18)$$

аналогичным образом из (15) следует выражение

$$N_{\mathbf{q}}^{\lt}(z) = e^{-(d-z)/l_n} \left[\alpha_2 n_q(T_H) + \beta_2 n_q(T_e(d)) \right] + n_q(T_e(z)) + \frac{dn_q}{dT_e} \frac{dT_e}{dz} l_n - n_q(T_e(z)) e^{-(d-z)/l_n} - \frac{dn_q}{dT_e} \frac{dT_e}{dz} e^{-(d-z)/l_n} \left(\frac{d-z}{l_n} + 1 \right) l_n. \quad (19)$$

Если $z \gg l_n$ и $(d-z)/l_n \gg 1$, то членами, которые содержат e^{z/l_n} и $e^{-(d-z)/l_n}$ можно пренебречь. Таким образом, в области, удаленной от переходных слоев, поток тепла может быть представлен равенством

$$Q_z = -k_e(T_e(z)) \frac{dT_e}{dz} - 2 \int_{q_z > 0} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_q \frac{s_{nz}^2}{v_{nq}} \frac{dn_q}{dT_e} \frac{dT_e}{dz}. \quad (20)$$

Поскольку при $z \gg l_n$ и при $(d-z) \gg l_n$ электроны и фононы термализованы, уравнение (20) может также быть записано в виде

$$Q_z = -k_e(T_e(z)) \frac{dT_e}{dz} - k_p(T_e(z)) \frac{dT_e}{dz},$$

где

$$k_p = 2 \int_{q_z > 0} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_q \frac{s_{nz}^2}{v_{nq}} \frac{dn_q}{dT_e}. \quad (21)$$

(Здесь и ниже учтено, что в рассматриваемой области $T_p = T_e$.)

Заметим, что согласно (21) конечное значение фоновой теплопроводности связано с фоновыми электронными столкновениями. В чистых металлах частота фоновых электронных столкновений дается выражением (см., например, [15])

$$v_{nq} = \frac{m^2 \mu^2}{2\pi \hbar^4 \rho_n s_n} \hbar \omega_q, \quad (22)$$

в котором μ — константа потенциала деформации, имеющая порядок энергии Ферми ε_F , а m — эффективная масса электрона. Выражение (22) позволяет в явном виде вычислить фоновую теплопроводность:

$$k_p(T_e) = \frac{2\zeta(3)}{\pi} \frac{\hbar \rho_n s_n}{m^2 \mu^2} T_e^2. \quad (23)$$

Для сравнения приведем выражение для электронной теплопроводности:

$$k_e(T_e) = \frac{\pi^2}{9} \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} v_F l_i T_e, \quad (24)$$

где l_i — длина свободного пробега электронов при рассеянии на примесях.

По порядку величины теплопроводность фононов $k_p(T_e)$ можно записать как $k_p(T_e) \approx c_p(T_e) s_n l_{pe}$, а электронную теплопроводность — как $k_e(T_e) = c_e(T_e) v_F l_i$. Отношение этих теплопроводностей имеет порядок

$$\frac{k_p}{k_e} \sim \left(\frac{T_e}{\Theta_D} \right)^2 \frac{l_{pe}}{l_i},$$

где $l_{pe} = \hbar v_F / T_e$.

Заметим, что при низких температурах, когда фонов-примесным рассеянием и процессами переброса можно пренебречь, уменьшение l_i ведет к тому, что k_p может оказаться порядка k_e . Таким образом, чтобы k_p было много меньше k_e , N-металл не должен быть очень «грязным».

Из общего уравнения для $Q_z(z)$ можно получить уравнение для $T_e(0)$ и $T_e(d)$. Пусть $z = 0$, тогда

$$\frac{dT_e}{dz} \Big|_{z=0} = 0$$

и с учетом $d \gg l_n$

$$Q_z = - \int_{q_z > 0} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_q s_z \alpha_1 [n_q(T_e(0)) - n_q(T_B)] = - \frac{\pi^2}{120} \frac{\langle \alpha_1 \rangle}{\hbar^3 s_n^2} [T_e^4(0) - T_B^4], \quad (25)$$

$$\text{где } \langle \alpha_1 \rangle = \int_0^{\pi/2} \alpha_1(\theta) \sin(2\theta) d\theta.$$

В случае малых потоков тепла, когда $T_e(0) - T_B \ll T_B$,

$$Q_z = - \frac{\pi^2}{30} \frac{\langle \alpha_1 \rangle}{\hbar^3 s_n^2} T_B^3 [T_e(0) - T_B].$$

При $z = d$ имеем с учетом $\frac{dT_e}{dz} \Big|_{z=d} = 0$ и $d \gg l_n$

$$Q_z = - \int_{q_z > 0} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \hbar \omega_q s_{nz} \alpha_2 [n_q(T_H) - n_q(T_e(d))] = - \frac{\pi^2}{120} \frac{\langle \alpha_2 \rangle}{\hbar^3 s_n^2} [T_H^4 - T_e^4(d)].$$

В случае малых тепловых потоков, когда $T_H - T_B \ll T_B$ и $T_e(d) - T_B \ll T_B$, выражение для потока тепла имеет вид

$$Q_z = - \frac{\pi^2}{30} \frac{\langle \alpha_2 \rangle}{\hbar^3 s_n^2} T_B^3 [T_H - T_e(d)].$$

В N-области, удаленной от пограничных слоев, градиент электронной температуры с точностью до слагаемых, пропорциональных l_n / d , определяется равенством

$$\frac{dT_e}{dz} = \frac{[T_e(d) - T_e(0)]}{d}.$$

При $d \gg l_n$ эффективная теплопроводность N-слоя, $k_{\text{eff}} \equiv |Q_z| d / (T_H - T_B)$, может быть получена из системы уравнений

$$|Q_z| R_{\text{th},1} + |Q_z| R_{\text{th},2} = T_H - T_e(d) + T_e(0) - T_B, \quad (26)$$

$$|Q_z| = (k_e + k_p) [T_e(d) - T_e(0)] / d, \quad (27)$$

где электронная и фононная теплопроводности берутся при $T = T_B$, а тепловое сопротивление границы между металлом и изолятором записывается как [10]

$$R_{\text{th},i} = \frac{30 \hbar^3 s_n^2}{\pi^2 T_B^3} \frac{1}{\langle \alpha_i \rangle}. \quad (28)$$

Таким образом, при $d \gg l_n$ имеем

$$k_{\text{eff}} = \frac{d}{R_{\text{th},1} + R_{\text{th},2} + d / (k_e + k_p)}. \quad (29)$$

Заметим, что двухтемпературная модель, рассмотренная в разд. 3, дает для эффективной теплопроводности выражение (49), которое при $d \gg l_n$ в точности совпадает с результатом микроскопического расчета (29).

Перейдем к предельному случаю тонких N-слоев, $d \ll l_n$, когда детерминант системы $D = 1 - \beta_1 \beta_2$. Поскольку в линейном приближении по d / l_n нужно положить $\exp(-z / l_n) \approx 1$ и $\exp[-(d - z') / l_n] \approx 1$, то $J_1 = J_2 = dn_q(\bar{T}_e) / l_n$, где $\bar{T}_e = T_e(d/2)$. Таким образом, интегралы J_1 и J_2 имеют порядок d / l_n и в нулевом приближении по d / l_n ими можно пренебречь. Как следствие, в нулевом приближении по d / l_n фононная функция распределения задана равенствами

$$N_{\mathbf{q}}^> = \frac{1}{1 - \beta_1 \beta_2} \{ \beta_1 \alpha_2 n_q(T_H) + \alpha_1 n_q(T_B) \}, \quad (30)$$

$$N_{\mathbf{q}}^< = \frac{1}{1 - \beta_1 \beta_2} \{ \beta_2 \alpha_1 n_q(T_B) + \alpha_2 n_q(T_H) \}. \quad (31)$$

Пренебрегая электронным переносом тепла (так как в тонких N-слоях фононы не успевают передать энергию электронам), имеем

$$Q_z = - \frac{\pi^2}{120 \hbar^3 s_n^2} \left\langle \frac{\alpha_1 \alpha_2}{1 - \beta_1 \beta_2} \right\rangle (T_H^4 - T_B^4) \approx \frac{\pi^2 T_B^3}{30 \hbar^3 s_n^2} \left\langle \frac{\alpha_1 \alpha_2}{1 - \beta_1 \beta_2} \right\rangle (T_H - T_B). \quad (32)$$

Отсюда получаем результат

$$k_{\text{eff}} = \frac{\pi^2 d}{30\hbar^3 s_n^2} T_B^3 \left\langle \frac{\alpha_1 \alpha_2}{1 - \beta_1 \beta_2} \right\rangle, \quad (33)$$

где, как уже отмечалось, среднее по углам падения определяется равенством $\langle f \rangle = \int_0^{\pi/2} \sin 2\theta f(\theta) d\theta$.

3. Поперечная теплопроводность I₁/N/I₂ гетероструктуры в двухтемпературном приближении

В использованном выше микроскопическом подходе вычисление вклада фононов в поперечную теплопроводность I₁/N/I₂ системы потребовало решения кинетического уравнения. Для упрощения расчетов теплопроводности желательно использовать более простой феноменологический подход. Как будет показано ниже, подходящей для этого моделью может служить хорошо известное двухтемпературное приближение Каганова, Лифшица и Танатарова [16], где считается, что электроны и фононы имеют температуры T_e и T_p соответственно. Здесь мы будем предполагать, что эти температуры зависят от поперечной координаты z .

Сначала не будем учитывать сопротивление Капицы на I/N границе. При этом наиболее простой является постановка задачи с заданным потоком тепла Q_z , в который дают вклад как фононы, так и электроны. Поток тепла, связанный с фононами, определяется равенством $\mathbf{Q}_p = -k_p \nabla T_p$, где температура фононов подчиняется стационарному уравнению теплопроводности

$$-k_p \frac{d^2 T_p}{dz^2} = \Sigma(T_e^5 - T_p^5). \quad (34)$$

Здесь параметр Σ определяет силу электрон-фононного взаимодействия при низких температурах $T_B \ll \Theta_D$ [16]. Аналогичное уравнение для электронной температуры

$$-k_e \frac{d^2 T_e}{dz^2} = \Sigma(T_p^5 - T_e^5) \quad (35)$$

позволяет найти электронный вклад в поток тепла $\mathbf{Q}_e = -k_e \nabla T_e$.

В линейном приближении, когда $T_H - T_B \ll T_B$, температуры электронов и фононов мало отличаются от температуры подложки T_B , т.е. $T_e = T_B + \Delta T_e$ и $T_p = T_B + \Delta T_p$, где $\Delta T_e, \Delta T_p \ll T_B$. Если ввести времена электрон-фононной τ_{ep} и фонон-электронной τ_{pe} энергетической релаксации согласно равенству $5\Sigma T_B^4 = c_p / \tau_{pe} = c_e / \tau_{ep}$, то в рассматриваемом стационарном случае уравнения для T_p и T_e имеют вид

$$\frac{d^2 \Delta T_p}{dz^2} + \frac{c_p}{\tau_{pe} k_p} (\Delta T_e - \Delta T_p) = 0, \quad (36)$$

$$\frac{d^2 \Delta T_e}{dz^2} + \frac{c_e}{\tau_{ep} k_e} (\Delta T_p - \Delta T_e) = 0. \quad (37)$$

Чтобы использовать симметрию задачи, в этом разделе мы будем считать, что металлическая прослойка расположена в области $-d/2 < z < d/2$. При этом граничные условия имеют вид

$$T_p \left(-\frac{d}{2} \right) = T_B, \quad T_p \left(\frac{d}{2} \right) = T_H, \quad (38)$$

$$\frac{dT_e}{dz} \Big|_{-d/2} = \frac{dT_e}{dz} \Big|_{d/2} = 0. \quad (39)$$

Последнее выражение отражает тот факт, что электроны не переносят тепло через границы металлической прослойки. Заметим, что вследствие симметрии $\Delta T_p(0) = \Delta T_e(0) = \Delta T / 2$, где $\Delta T = T_H - T_B$.

Уравнение для теплового потока

$$Q_z = -k_p \frac{d\Delta T_p}{dz} - k_e \frac{d\Delta T_e}{dz} \quad (40)$$

можно проинтегрировать от нуля до некоторой координаты z . Поскольку поток тепла в металлической прослойке постоянен, имеем равенство

$$\Delta T_p = \frac{1}{k_p} \left[-k_e \Delta T_e(z) + \frac{(k_p + k_e)}{2} \Delta T - Q_z z \right]. \quad (41)$$

Из уравнения (37) следует, что

$$-k_e \frac{d^2 \Delta T_e}{dz^2} + \frac{c_p}{\tau_{pe}} \left[\Delta T_e + \frac{1}{k_p} \left(k_e \Delta T_e - \frac{k_T}{2} \Delta T + Q_z z \right) \right] = 0, \quad (42)$$

где $k_T = k_e + k_p$. Решение уравнения для ΔT_e , удовлетворяющее граничному условию (39), имеет вид

$$\Delta T_e(z) = \frac{Q_z \lambda}{k_T} \frac{\text{sh}(z/\lambda)}{\text{ch}(d/2\lambda)} + \frac{\Delta T}{2} - \frac{Q_z}{k_T} z. \quad (43)$$

Подставив это выражение в (41), получаем также

$$\Delta T_p(z) = -\frac{k_e}{k_p} \frac{Q_z \lambda}{k_T} \frac{\text{sh}(z/\lambda)}{\text{ch}(d/2\lambda)} + \frac{\Delta T}{2} - \frac{Q_z}{k_T} z. \quad (44)$$

С учетом (38) для эффективной теплопроводности металлического слоя, $k_{\text{eff}} \equiv |Q_z| d / (T_H - T_B)$, имеем

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_T}{1 + \frac{k_e}{k_p} \frac{2\lambda}{d} \text{th} \frac{d}{2\lambda}}, \quad (45)$$

где, как и в предыдущих формулах,

$$\lambda = [\tau_{pe} k_e k_p / c_p (k_e + k_p)]^{1/2}.$$

Чтобы выяснить физический смысл λ , рассмотрим предельный случай $k_e \gg k_p$. В этом случае $\lambda = [\tau_{pe} k_p / c_p]^{1/2}$. Для газа теплопроводность $k \sim cl\bar{v}$, где c — удельная теплоемкость газа, l — средняя длина свободного пробега молекул газа, \bar{v} — средняя тепловая скорость молекул. Для газа фононов $\bar{v} = s$, и, если нет примесного рассеяния, $l = l_{pe} = s\tau_{pe}$. Таким образом, для газа фононов имеем $k_p = c_p s^2 \tau_{pe}$, и $\lambda \sim s\tau_{pe} = l_{pe}$. Следовательно, λ — это средняя длина, на которой фононы передают свою энергию электронам.

Рассмотрим предельные случаи. В случае малых толщин, $d \ll \lambda$, эффективная теплопроводность $k_{\text{eff}} \approx k_p$. Поскольку большим значения λ соответствуют большие значения τ_{pe} , в случае плохой передачи тепла от фононов к электронам эффективная теплопроводность определяется теплопроводностью фононного газа. При толщинах $d \gg \lambda$ эффективная теплопроводность $k_{\text{eff}} \approx k_e + k_p$. Поскольку считается, что $k_e \gg k_p$, то при $d \gg \lambda$, т.е. при хорошей передаче тепла от фононов к электронам и высокой электронной теплопроводности перенос тепла в основном осуществляется электронами $k_{\text{eff}} \approx k_e$.

Учет теплового сопротивления Капицы не вызывает затруднений. Прежде всего заметим, что при учете теплового сопротивления Капицы уравнения (36) и (37) для ΔT_p и ΔT_e не изменятся. Когда $Q_z \neq 0$, на I/N-границах возникает скачок температуры $\Delta T_k = |Q_z| R_{\text{th}}$, где R_{th} — тепловое сопротивление границы. Скачок температуры ΔT_k меняет граничные условия для фононной температуры. Они принимают вид

$$T_H = T_p \left(\frac{d}{2} \right) + \Delta T_k, \quad T_B = T_p \left(-\frac{d}{2} \right) - \Delta T_k. \quad (46)$$

Граничные условия для ΔT_e не меняются. Как следствие, ΔT_e и ΔT_p по-прежнему описываются формулами (43) и (44).

Для эффективной теплопроводности получаем равенство

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_T}{1 + \frac{k_e}{k_p} \frac{2\lambda}{d} \text{th} \frac{d}{2\lambda} + 2 \frac{k_T}{d} R_{\text{th}}}. \quad (47)$$

В случае тонких N-слоев, когда $d \ll \lambda$, величина $k_{\text{eff}} \approx (1/k_p + 2R_{\text{th}}/d)^{-1}$, т.е. в эффективной теплопроводности электронный вклад выпадает, и конкурируют фононная теплопроводность и сопротивление Капицы. Если толщина d достаточно мала, $d \ll k_p R_{\text{th}}$, то $k_{\text{eff}} = d/2R_{\text{th}} \ll k_p$, т.е. эффективная теплопроводность N-слоя определяется акустическими свойствами N/I-границ.

В другом предельном случае $d \gg \lambda$ эффективная теплопроводность

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_T}{1 + \frac{k_e}{k_p} \frac{2\lambda}{d} + 2 \frac{k_T}{d} R_{\text{th}}}. \quad (48)$$

При достаточно больших d два последних слагаемых в знаменателе малы по сравнению с единицей и $k_{\text{eff}} = k_T = k_e + k_p$. Таким образом, в случае достаточно толстых N-слоев их теплопроводность определяется теплопроводностями электронной и фононной подсистем.

Выше мы считали тепловые сопротивления на N/I₁ и I₂/N границах одинаковыми. Если же тепловые сопротивления интерфейсов N/I₁ и I₂/N различны и равны $R_{\text{th},1}$ и $R_{\text{th},2}$, то можно показать, что эффективная теплопроводность будет равна

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_T}{1 + \frac{k_e}{k_p} \frac{2\lambda}{d} \text{th} \frac{d}{2\lambda} + \frac{k_T}{d} (R_{\text{th},1} + R_{\text{th},2})}. \quad (49)$$

Заметим, что это выражение при $d \gg l_n$ в точности совпадает с результатом микроскопического расчета (29). Вместе с тем при малых толщинах N-слоя, $d \ll l_n$, двухтемпературная модель дает только качественно правильный результат, поскольку при малых толщинах нельзя корректно ввести ни фононную температуру T_p , ни фононную теплопроводность k_p .

4. Заключение

В представленной работе проанализирован поперечный перенос тепла в слоистой I₁/N/I₂ гетероструктуре при низких температурах, когда электроны в N-слое термализованы. В разд. 2 анализ основан на кинетическом уравнении Больцмана для фононной функции распределения с граничными условиями, учитывающими отражение и преломление акустических волн при их прохождении через межслоевые интерфейсы. В разд. 3 поперечная эффективная теплопроводность вычислена в двухтемпературном приближении, т.е. в терминах электронной и фононной температур. Сравнение результатов разд. 2 и 3 показывает, что относительно простое двухтемпературное приближение корректно описывает кинетику теплопереноса в многослойной системе только в случае толстых N-слоев, когда толщина слоя значительно больше фонон-электронной длины свободного пробега. Для более тонких N-слоев двухтемпературное приближение дает неверное выражение для эффективной поперечной теплопроводности слоистой структуры.

Из полученных результатов (29) и (33) следует, что при малых толщинах N-слоя поперечная теплопроводность слоистых наноструктур в основном определяется межслоевыми границами, точнее, акустическим рассогласованием смежных материалов. Это значит, что улучшению теплоотвода в нанoeлектронных устройствах в первую очередь препятствуют межслоевые границы. Иными словами, для улучшения теплоотвода в таких

устройствах нужно подбирать смежные материалы с мало отличающимися акустическими импедансами.

Согласно формуле (29) размерный эффект в теплопроводности слоистых наноструктур начинает проявляться при толщинах N-слоев $d_{cr} \sim R_{th} k_T$. Если $d \gg d_{cr}$, теплопроводность N-слоя приблизительно равна суммарной теплопроводности электронов и фононов, если же $d \ll d_{cr}$, рассеяние электронов и фононов в N-слое (т.е. качество материала N-слоя) играет малую роль, и поперечная теплопроводность слоистых наноструктур определяется акустическим рассогласованием смежных материалов. Отметим также, что величина d_{cr} увеличивается при уменьшении температуры термостата. Таким образом, при создании электронных устройств, элементы которых имеют субмикронные размеры, необходимо учитывать размерный эффект в теплопроводности и его зависимость от температуры.

Рассмотренная выше задача о поперечной теплопроводности N-слоя может быть распространена на гетероструктуры с промежуточным слоем диэлектрика, ферродиэлектрика или слабо легированного полупроводника, поскольку теплопроводность этих материалов определяется фононами, а этот механизм передачи тепла можно описать в рамках развитого формализма, если положить частоту фонон-электронных столкновений $\nu_{nq} = 0$. Заметим, что для диэлектрических наноструктур полученные результаты могут быть распространены на более широкую область температур, так как в этом случае не требуется выполнение условия термализации электронов.

Полученные результаты могут быть также применены в области спин-калоритроники, поскольку спиновый ток может генерироваться как градиентом температуры в ферродиэлектрике, так и скачком температуры на границе ферродиэлектрика и нормального металла (см., например, [17]). Развитый микроскопический формализм позволяет в равной мере учитывать оба механизма генерации спинового тока.

Устройства нанoeлектроники работают прежде всего в нестационарных режимах. Акустическое рассогласование сред приводит, в частности, к заперению в N-слое фононов с углами падения, большими, чем угол полного внутреннего отражения, что увеличивает постоянную времени устройства и уменьшает его быстродействие [18]. Для преодоления этого недостатка нужно использовать смежные материалы с близкими акустическими импедансами.

Как было отмечено во Введении, задача о поперечной теплопроводности многослойных структур рассматривалась ранее в ряде работ. В одной из первых работ [5] из кинетического уравнения Больцмана было получено уравнение радиационного фононного теплопереноса и выражение для потока тепла через $I_1/N/I_2$ структуру. Заметим, что поскольку в статье [5] не учитывалось отражение фононов на межслоевых грани-

цах, акустические характеристики этих границ не вошли в выражение для эффективной теплопроводности, что не согласуется с нашими результатами (29) и (33). В последующей работе [19], где рассмотрена $N/I/N$ структура, отражение фононов от N/I-границ также не учитывалось, поскольку эти границы считались термализованными и излучающими фононы аналогично тому, как излучает фотоны абсолютно черное тело. В статье [20] в рамках двухтемпературного приближения изучался перенос тепла в многослойной $N/I/N/I$ системе. Согласно нашему анализу (разд. 3) применимость результатов статьи [20] ограничена случаем толстых N-слоев. Рассмотренный же в настоящей работе формализм применим для описания многослойных структур с произвольной толщиной слоев аналогично тому, как это сделано при анализе тепловых свойств гетероструктур, содержащих два металлических слоя [21].

Подводя итог, можно утверждать, что представленный в настоящей статье подход, который основан на кинетическом уравнении Больцмана для фононов и граничных условиях, соответствующих реальным N/I границам, позволяет аналитически описывать кинетику поперечного переноса тепла в слоистых структурах с учетом отражения и преломления акустических волн на межслоевых границах. Заметим, что этот формализм также позволяет учесть конверсию продольных и поперечных фононных мод на N/I границах и, как следствие, найти вклад поперечных фононных мод в теплопроводность слоистых наноструктур. Согласно ссылкам [22,23] этот формализм также допускает обобщение на случай нестационарного нагрева слоистых систем.

Работа выполнена при поддержке программы Европейского Союза Horizon 2020 в рамках гранта № 644348. Работа также поддержана проектом МОН Украины № 0118U002037.

1. E. Pop, *Nano Res.* **3**, 147 (2010).
2. A.D. Franklin, *Science* **349**, aab2750 (2015).
3. G.E.W. Bauer, E. Saitoh, and B.J. van Wees, *Nature Mater.* **11**, 391 (2012).
4. S.R. Boona, R.C. Myers, and J.P. Heremans, *Energy Environ. Sci.* **7**, 885 (2014).
5. A. Majumdar, *J. Heat Transfer* **115**, 7 (1993).
6. G. Chen, *Phys. Rev. B* **57**, 14958 (1998).
7. J. Ordóñez-Miranda, R. Yang, S. Volz, and J.J. Alvarado-Gil, *J. Appl. Phys.* **118**, 075103 (2015).
8. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1979).
9. C. Hua and A.J. Minnich, *J. Appl. Phys.* **117**, 175306 (2015).
10. В.А. Шкловский, *ЖЭТФ* **78**, 1281 (1980).
11. Е.М. Gershenson, М.Е. Gershenson, G.N. Gol'tsman, A.D. Semenov, and A. V. Sergeev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **36**, 244 (1982) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **36**, 296 (1982)].
12. A.W. Little, *Can. J. Phys.* **37**, 334 (1959).

13. S.B. Kaplan, *J. Low Temp. Phys.* **37**, 343 (1979).
14. E.T. Swartz and R.O. Pohl, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 605 (1989).
15. A.H. Wilson, *The Theory of Metals*, Cambridge University Press, London (1953).
16. M.I. Kaganov, I.M. Lifshitz, and L.V. Tanatarov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **31**, 232 (1956) [*Sov. Phys. JETP* **4**, 173 (1957)].
17. Y.H. Shen, X.S. Wang, and X.R. Wang, *Phys. Rev. B* **94**, 014403 (2016).
18. A.I. Bezuglyj and V.A. Shklovskij, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 295001 (2018).
19. A.A. Joshi and A. Majumdar, *J. Appl. Phys.* **74**, 31 (1993).
20. J. Ordonez-Miranda, J.J. Alvarado-Gil, and R. Yang, *J. Appl. Phys.* **109**, 094310 (2011).
21. А.І. Безуглий, *ФНТ* **41**, 798 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 619 (2015)].
22. А.І. Безуглий, В.А. Шкловский, *ЖЭТФ* **111**, 2106 (1997).
23. А.І. Безуглий, В.А. Шкловский, *ФНТ* **39**, 459 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 357 (2013)].

Мікроскопічний аналіз перенесення тепла в $I_1/N/I_2$
гетерогенних наноструктурах
при низьких температурах

О.І. Безуглий, В.О. Шкловський, Р.В. Вовк,
І.В. Мироненко

У статті представлено кінетичний підхід, в рамках якого аналітично розглянуто поперечний перенос тепла через металевий шар, який розташований між двома масивними діелектриками. Обчислена ефективна поперечна теплопровідність такої шаруватої системи при довільному значенні товщини металевого шару і знайдені товщини, при яких в

теплопровідності проявляється розмірний ефект. Поперечний теплоперенос аналізується також в рамках феноменологічної двотемпературної (2ТМ) моделі, тобто в термінах електронної та фононної температур. Порівняння результатів 2ТМ і мікроскопічного підходу дозволяє з'ясувати умови, при яких двотемпературний підхід, що часто використовується, не може бути застосований.

Ключові слова: шарувата наноструктура, фононна теплопередача, електронна теплопровідність, низькі температури.

Microscopic analysis of heat transfer in $I_1/N/I_2$
heterogeneous nanostructures at low temperatures

A.I. Bezuglyj, V.A. Shklovskij, R.V. Vovk,
and I.V. Mironenko

The article presents a kinetic approach, in which the transverse heat transfer through a metal layer located between two massive dielectrics is analytically considered. The effective transverse thermal conductivity of such a layered system is calculated for an arbitrary value of the thickness of the metal layer and the thickness is found at which the size effect appears in thermal conductivity. Transverse heat transfer is also analyzed in the framework of the phenomenological two-temperature (2TM) model, i.e., in terms of electron and phonon temperatures. Comparison the results of 2TM and the microscopic approach allows us to find out the conditions under which the frequently used two-temperature approach is not applicable.

Keywords: layered nanostructure, phonon heat transfer, electronic thermal conductivity, low temperatures.