

УДК 544.022.341

Обратная коэффициентная задача теплопереноса в слоистых наноструктурах

© 2017 г. К. К. Абгарян^{1,2,§}, Р. Г. Носков¹, Д. Л. Ревизников^{1,2}¹ *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*² *Вычислительный центр им. А. А. Дородницына
Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. Стремительное развитие электроники естественным образом приводит к созданию и использованию электронных компонент малых размеров, в число которых входят наноэлементы сложной (слоистой) структуры. Поиск эффективных методов охлаждения электронных систем диктует необходимость развития методов численного анализа тепловыделения и теплопереноса в наноструктурах. Характерной особенностью теплопереноса в слоистых наноструктурах является доминирующая роль контактного термического сопротивления на межслоевых интерфейсах (тепловой проводимости интерфейсов). При этом контактное сопротивление зависит от целого ряда факторов, связанных с технологией изготовления гетероструктур, что обуславливает необходимость определения соответствующих коэффициентов по результатам температурных измерений.

Рассмотрена возможность восстановления коэффициентов термического сопротивления на границах соприкосновения слоев, изготовленных из разных материалов, с помощью решения обратной задачи теплопереноса. Комплекс алгоритмов состоит из двух основных блоков: блока решения прямой задачи теплопереноса в слоистой наноструктуре и блока оптимизации для решения обратной задачи. Прямая задача сформулирована в алгебраическом (разностном) виде в предположении о постоянстве температуры в пределах каждого слоя, что связано с малой толщиной слоев. Обратная задача решена в экстремальной постановке, оптимизация проведена с помощью методов нулевого порядка, не требующих вычисления производных оптимизируемой функции. В качестве базового оптимизационного алгоритма использован метод Нелдера—Мида (деформируемого многогранника) в сочетании со случайными рестартами для поиска глобального минимума.

Представлены результаты восстановления коэффициентов контактного термического сопротивления, полученные в рамках квазиреального эксперимента. Дана оценка точности решения задачи идентификации в зависимости от числа слоев в гетероструктуре и от погрешности «измерений».

Полученные результаты планируется использовать в новой методике многоуровневого моделирования тепловых режимов электронной компонентной базы СВЧ-диапазона, при идентификации коэффициентов теплопроводности элементов гетероструктур.

Ключевые слова: теплоперенос, слоистая наноструктура, гетероструктура, коэффициенты контактного термического сопротивления, интерфейс, обратная задача

Введение

Стремительное развитие электроники естественным образом приводит к созданию и использованию электронных компонент малых размеров, в число которых входят наноэлементы сложной (слоистой) структуры [1—3]. Поиск эффективных методов охлаждения электронных систем дикту-

ет необходимость развития методов численного анализа тепловыделения и теплопереноса в наноструктурах. Генерация тепла в современных полупроводниковых гетероструктурах связана, главным образом, с неупругим рассеянием электронов [4—6]. Применительно к таким гетероструктурам перспективной является многомасштабная схема моделирования. Она объединяет квантово-механические расчеты на атомарном уровне, расчет распределения носителей в гетероструктуре на основе решения системы уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния [7, 8].

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2,§} — кандидат физ.-мат. наук, зав. кафедрой (1), зав. отделом (2), e-mail: kristal83@mail.ru; **Носков Роман Геннадиевич**¹ — магистр, e-mail: noskovrg@gmail.com; **Ревизников Дмитрий Леонидович**^{1,2} — доктор физ.-мат. наук профессор (1); ведущий научный сотрудник (2), e-mail: reviznikov@inbox.com

§ Автор для переписки

Вопросы распространения тепла в наноразмерных слоистых структурах подробно рассмотрены в ряде монографий и обзоров [9—13]. Характерной особенностью переноса энергии в таких системах является доминирующая роль контактного термического сопротивления на межслоевых интерфейсах, представляющая обратную величину к тепловой проводимости Капицы [14—16]. Поскольку контактное сопротивление зависит от целого ряда факторов, связанных с технологией изготовления гетероструктур, большое значение приобретает определение соответствующих коэффициентов по результатам температурных измерений. Наиболее универсальный метод идентификации коэффициентов по экспериментальным данным — это решение обратных задач математической физики [17, 18]. В работах [19, 20] рассмотрены некоторые обратные задачи применительно к оптимизации электронных свойств наноразмерных полупроводниковых гетероструктур.

Ниже рассмотрены обратные задачи теплопереноса в гетероструктурах с целью идентификации коэффициентов термического сопротивления (тепловой проводимости) интерфейсов.

Постановка задачи

На рис. 1, а представлена общая схема слоистой структуры на примере структуры из 5 слоев.

Длина свободного пробега фононов и электронов превышает толщину слоев в наноструктурах, поэтому применение классического закона Фурье для описания теплопроводности проблематично. Ниже использована модель теплопереноса, предложенная в работе [1]. В каждом слое температура считается постоянной по толщине, а на межслоевых интерфейсах реализуется эффект скачка температуры, обусловленный контактным термическим сопротивлением. Таким образом, предполагается, что теплоперенос лимитирован процессами рассеяния фононов и электронов в зонах соприкосновения

материалов. Механизм распространения тепла и баланса энергии *i*-ого слоя представлены на рис. 1, б.

Математическая модель может быть представлена следующей системой уравнений

$$\rho_i c_i h_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \mu_{i-1} (T_{i-1} - T_i) - \mu_i (T_i - T_{i+1}). \quad (1)$$

или в разностном виде

$$\frac{\rho_i c_i h_i (T_i^{k+1} - T_i^k)}{\tau} = \mu_{i-1} (T_{i-1}^{k+1} - T_i^{k+1}) - \mu_i (T_i^{k+1} - T_{i+1}^{k+1}), \quad (2)$$

где *i* — номер слоя, *i* = 2, ..., *n* - 1, *n* — число слоев в структуре; *T* — температура; ρ — плотность материала; *c* — удельная массовая теплоемкость; *h* — ширина слоя; *t* — время; τ — шаг по времени; *k* — номер временного шага; μ — коэффициент тепловой проводимости интерфейса.

Коэффициенты тепловой проводимости интерфейсов μ_i могут зависеть от температуры, однако в настоящей работе принято упрощающее предположение об их постоянстве.

Система уравнений (2) дополняется начальными и граничными условиями.

В начальный момент времени задается распределение температуры в структуре

$$T_i(t^0) = T_i^0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3)$$

В качестве граничных условий, как правило, задаются условия теплообмена с внешней средой, например:

$$\frac{\rho_1 c_1 h_1 (T_1^{k+1} - T_1^k)}{\tau} = q_l(t) - \mu_1 (T_1^{k+1} - T_2^{k+1}); \quad (4)$$

$$\frac{\rho_n c_n h_n (T_n^{k+1} - T_n^k)}{\tau} = \mu_{n-1} (T_{n-1}^{k+1} - T_n^{k+1}) - q_r(t), \quad (5)$$

где $q_l(t)$, $q_r(t)$ — тепловые потоки на левой и правой границах соответственно.

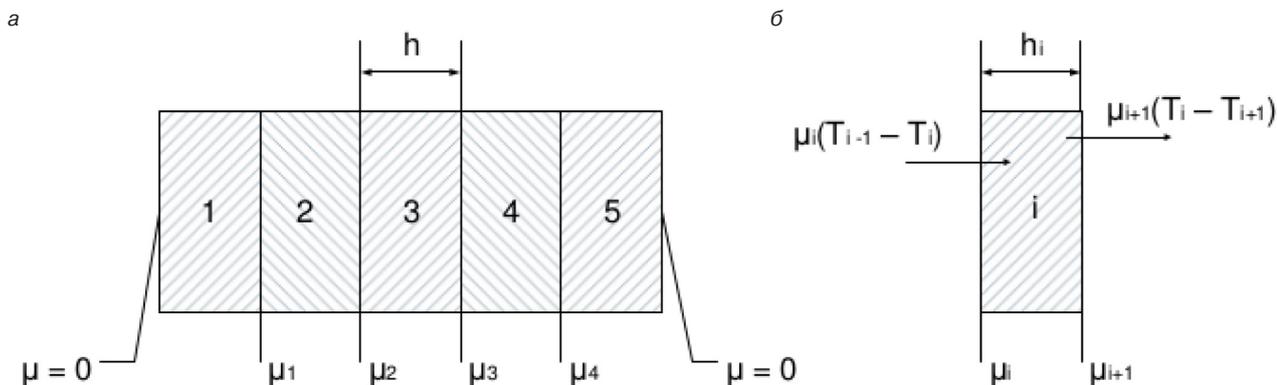


Рис. 1. Общий вид слоистой наноструктуры (а) и механизм распространения тепла через *i*-й слой (б)
 Fig. 1. General view of a layered nanostructure (a) and the mechanism of heat propagation through the *i*th layer (б)

Решение прямой задачи (2)—(5) позволяет по заданным характеристикам слоистой структуры, начальным и граничным условиям определить распределение температуры в структуре в различные моменты времени. Система (2)—(5) имеет трехдиагональную матрицу и легко решается методом прогонки.

Постановка обратной коэффициентной задачи теплопереноса предполагает наличие дополнительной информации о температуре, на основании которой необходимо определить коэффициенты тепловой проводимости интерфейсов μ_i .

В качестве такой дополнительной информации рассматривали значения температур граничных слоев:

$$T_1(t) = T_l^*(t), T_n(t) = T_r^*(t). \quad (6)$$

Таким образом, моделировали процесс восстановления коэффициентов тепловой проводимости интерфейсов по измерениям температур внешних поверхностей структуры.

В результате обратную задачу для идентификации искомым коэффициентов можно сформулировать в следующей экстремальной постановке:

$$F(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) = \left(\frac{1}{2K} \sum_{k=1}^K (T_1^k - T_l^{*k})^2 + \sum_{k=1}^K (T_n^k - T_r^{*k})^2 \right)^{1/2} \rightarrow \min_{\mu_i} \quad (7)$$

при условиях (2)—(5).

Иными словами, необходимо найти вектор неизвестных коэффициентов $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$, при котором функция ошибки $F(\mu)$ достигает минимума при условии, что температуры T_1^k, T_n^k получены из решения системы (2)—(5).

Задачу минимизации решали с помощью методов нулевого порядка, не требующих вычисления производных оптимизируемой функции. В качестве базового оптимизационного алгоритма использовали метод Нелдера—Мида (деформируемого многогранника) в сочетании со случайными рестартами для поиска глобального минимума. Описание используемых алгоритмов можно найти, например, в работе [20].

Результаты расчетов и их обсуждение

Обратную задачу (2)—(7) решали в режиме квазиреального эксперимента. Сначала задавали коэффициенты тепловой проводимости μ_i , после чего решали прямую задачу (2)—(5) и определяли временные зависимости температур приповерхностных слоев $T_1(t), T_n(t)$. Далее эти зависимости зашумлялись гауссовым белым шумом с заданной дисперсией, что имитировало измерение темпера-

тур внешних поверхностей слоистой структуры с определенной погрешностью. В результате получали «измеренные» значения температур приповерхностных слоев $T_l^*(t), T_r^*(t)$. На основании зашумленных данных решали обратную задачу (2)—(7).

В качестве начального распределения температур принималась ступенчатая функция: $T_1(t^0) = T_w, T_i(t^0) = T_s, i = 2, \dots, n$. То есть предполагали, что первый слой нагрет до температуры T_w , тогда как остальные слои имеют постоянную температуру T_s . Такой вариант соответствует импульсному нагреву одной из внешних поверхностей слоистой структуры. В качестве граничных условий рассматривали нулевые тепловые потоки $q_l(t) = 0, q_r(t) = 0$, т. е. предполагали, что теплоперенос в структуре протекает в адиабатических условиях, без теплообмена с внешней средой. Разумеется, принятая модель лишь приближенно отражает условия реального эксперимента, в более строгой постановке необходимо задание теплового потока к поверхности $q_l(t)$ в период ее нагрева.

Отметим, что для двухслойной структуры при принятых начальных и граничных условиях несложно записать аналитическое решение исходной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1):

$$T_1(t) = T_m + \frac{C_2}{C_1 + C_2} (T_w - T_s) \exp\left(-\mu_1 \frac{C_1 + C_2}{C_1 C_2} t\right);$$

$$T_2(t) = T_m - \frac{C_1}{C_1 + C_2} (T_w - T_s) \exp\left(-\mu_1 \frac{C_1 + C_2}{C_1 C_2} t\right),$$

где $T_m = \frac{C_1 T_w + C_2 T_s}{C_1 + C_2}$ — стационарная температура

системы, к которой происходит установление с течением времени; C_1, C_2 — объемные теплоемкости слоев, $C = \rho ch$, где c — теплоемкость; ρ — плотность.

Вычислительные эксперименты проводили при значениях определяющих параметров, аналогичных принятым в работах [21, 22]. Ширину слоев считали одинаковой, равной 50 нм. Полагали, что изначально вся структура нагрета равномерно и имеет температуру $T_s = 300$ К. К первому слою прикладывали внешнее импульсное воздействие, вследствие чего слой мгновенно нагревался до температуры $T_w = 900$ К. Число слоев в структуре варьировали от 2 до 5. Значения теплоемкости и плотности материалов приведены в таблице. Значения тепловой проводимости межслоевых интерфейсов — ниже.

Интерфейс	$\mu, 10^9 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$
I → II	1,92
II → III	9,6
III → IV	8,43
IV → V	5,62

Физические характеристики слоев
[Physical characteristics of the layers]

Параметр	Номер слоя				
	I	II	III	IV	V
$c, \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	424,0	327,0	853,0	390,0	873,0
$\rho, \text{ кг}/\text{м}^3$	6258,0	5242,0	9436,0	3415,0	8913,0

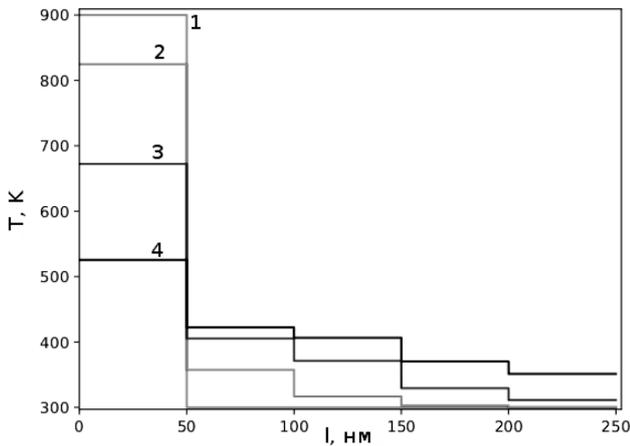


Рис. 2. Профили температуры в структуре из 5 слоев в различные моменты времени $t, \text{ с}$:
1 — 0; 2 — $1 \cdot 10^{-11}$; 3 — $4 \cdot 10^{-11}$; 4 — $1 \cdot 10^{-10}$
Fig. 2. Temperature profiles in the structure of 5 layers at different points in time $t, \text{ s}$:
(1) 0; (2) $1 \cdot 10^{-11}$; (3) $4 \cdot 10^{-11}$; (4) $1 \cdot 10^{-10}$

Результаты решения прямой задачи для пятислойной структуры показаны на рис. 2, где представлены распределения температуры в различные моменты времени. Расчеты проведены с шагом $\tau = 1 \cdot 10^{-12} \text{ с}$.

Зависимости граничных температур от времени $T_1(t), T_n(t)$ для рассматриваемой структуры представлены на рис. 3. Верхняя кривая соответствует

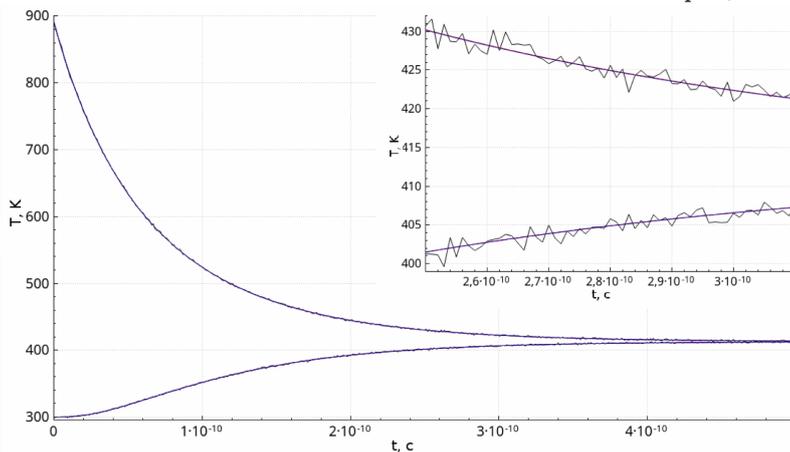


Рис. 3. Зависимости температуры на левой (график сверху) и правой (график снизу) границах от времени для структуры из 5 слоев.
Вставка — зашумление зависимостей $T_1(t), T_n(t)$, имитирующие процесс измерения
Fig. 3. Temperature dependences on the left (graph above) and right (graph below) boundaries on time for a structure of 5 layers.
Insertion — noise reduction of $T_1(t), T_n(t)$, dependences, imitating the measurement process

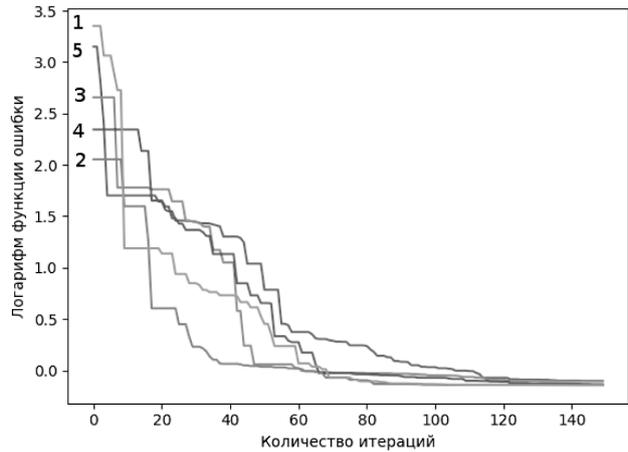


Рис. 4. Зависимости логарифма функции ошибки от номера итерации для структуры из 5 слоев:
1 — рестарт № 1; 2 — рестарт № 2; 3 — рестарт № 3; 4 — рестарт № 4; 5 — рестарт № 5
Fig. 4. Dependences of the logarithm of the error function on the iteration number for the structure of 5 layers:
(1) restart number 1; (2) restart number 2; (3) restart number 3; (4) restart number 4; (5) restart number 5

температуре на левой границе (температура первого слоя $T_1(t)$), а нижняя — правой границе ($T_n(t)$). Так как рассматривается теплоизолированная система, то с течением времени вследствие распространения тепла по структуре температуры на левой и правой границах выравниваются, по всей структуре устанавливается постоянная температура. На вставке к рис. 3, проиллюстрировано зашумление этих зависимостей, имитирующее процесс измерения. Задано нормальное распределение шумовой компоненты с относительным среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0,002$, что равносильно средней ошибке измерений примерно в 1—2 К.

Зашумленные данные используют при решении обратной задачи по восстановлению коэффициентов тепловой проводимости интерфейсов.

При этом достигаемый в процессе минимизации уровень функции $F(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$ согласовывается с задаваемой погрешностью «измерений» (уровнем накладываемого шума). Картина изменения минимизируемой функции в зависимости от числа итераций представлена на рис. 4. Здесь разные кривые соответствуют различным начальным приближениям для значений μ_i . Начальные значения для каждого рестарта генерировались случайно равномерно распределенными в интервале $(0,01—1,0) \times 10^{10} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$.

Поскольку моделирование проводили в режиме квазиреального эксперимента, имеется возможность сравнить полученные в результате решения обратной задачи коэффициенты μ_i с точными значениями, которые задавали при

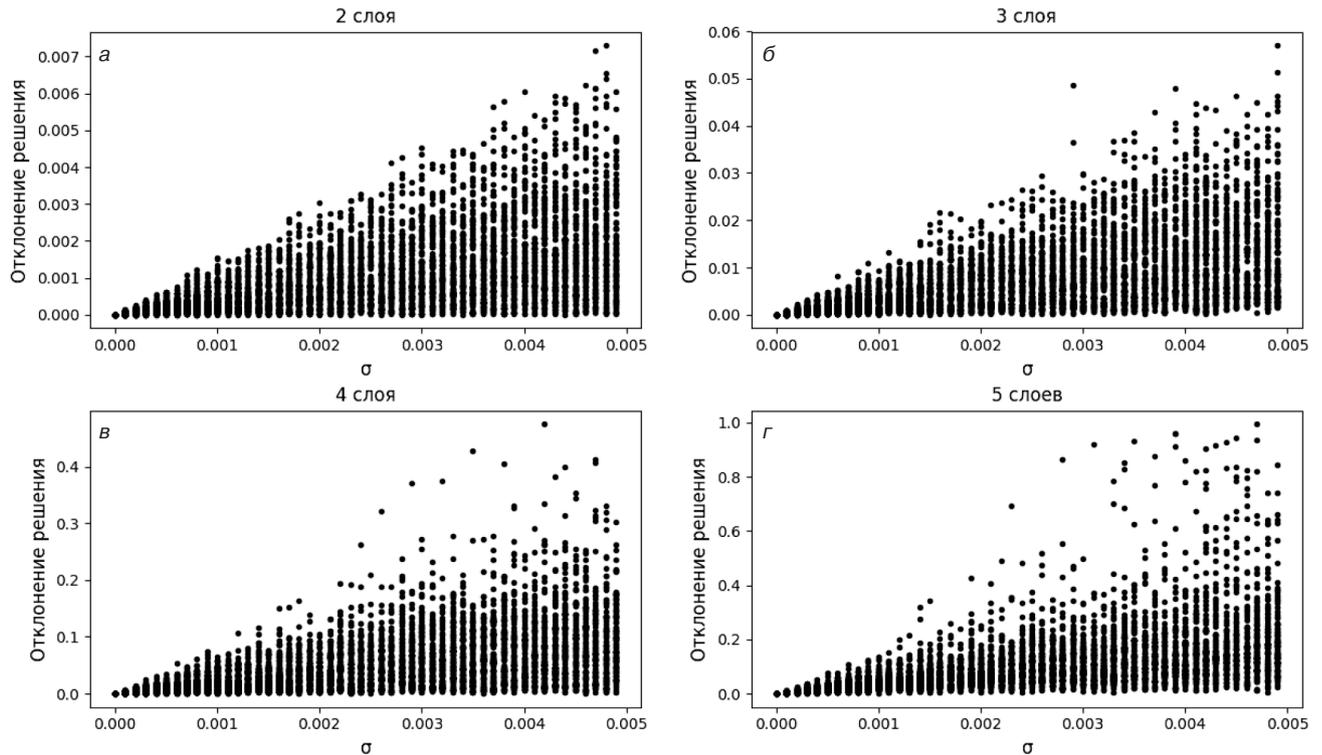


Рис. 5. Плотность распределения погрешности решения σ в зависимости от интенсивности шума для структуры из нескольких слоев: а — 2 слоя; б — 3; в — 4; г — 5

Fig. 5. The density of the distribution of the solution error σ depending on the noise intensity for the structure of several layers: (a) 2 layers; (б) 3; (в) 4; (г) 5

решении прямой задачи. Погрешность идентификации коэффициентов определяли как

$$E = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{\mu_i^* - \mu_i}{\mu_i^*} \right)^2},$$

где n — количество слоев в структуре; μ_i^* — исходные коэффициенты, используемые при решении прямой задачи; μ_i — коэффициенты, найденные в процессе минимизации функции $F(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$.

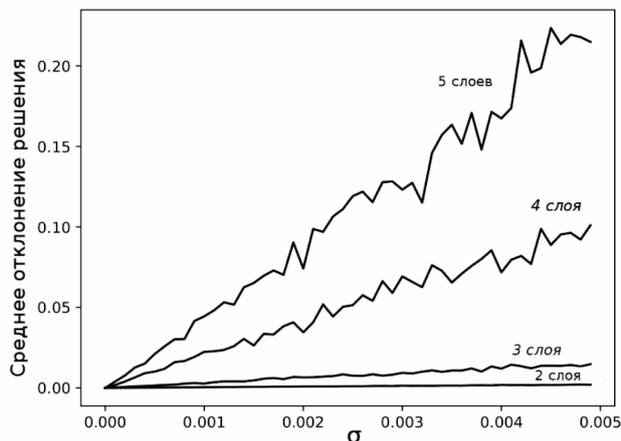


Рис. 6. Зависимости средней погрешности идентификации от интенсивности шума для структур из 2 (1), 3 (2), 4 (3) и 5 (4) слоев

Fig. 6. Dependences of the average identification error on the noise intensity for structures of 2 (1), 3 (2), 4 (3) and 5 (4) layers

Значения E в зависимости от погрешности «измерений» σ для различного числа слоев в структуре представлены на рис. 5. Точками показаны значения, полученные при различных реализациях случайных величин. На рис. 6 показаны зависимости погрешности идентификации коэффициентов от погрешности «измерений» (интенсивность шума), усредненные по реализациям случайных величин.

Как и следовало ожидать, зависимости носят линейный характер, погрешность идентификации повышается при росте интенсивности шума и при увеличении количества слоев в структуре. Однако даже для структуры из 5 слоев при зашумлении «измерений» со среднеквадратичным отклонением, лежащим в интервале 0—0,005, среднее отклонение поученного решения от точного остается в пределах 0—25 %.

Заключение

Представлены результаты восстановления коэффициентов тепловой проводимости интерфейсов в наноразмерных слоистых структурах по дополнительной информации о температурах внешних поверхностей. Показано, что точность идентификации зависит от количества слоев и погрешности измерений. При погрешности измерений в 1—2 К восстановление коэффициентов будет в среднем удовлетворять десятипроцентному отклонению от

реальных значений для наноструктур, содержащих до 5 слоев.

Полученные результаты планируется использовать в новой методике многоуровневого моделирования тепловых режимов электронной компонентной базы СВЧ–диапазона, при идентификации коэффициентов теплопроводности элементов гетероструктур.

Библиографический список

1. Борисенко В. Е., Воробьева А. И., Уткина Е. А. Наноэлектроника. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. 223 с.
2. Vasileska D., Goodnick S. M., Goodnick S. Computational electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation. CRC Press, 2010. 782 p.
3. Chu R. C. The challenging of electronic cooling: past, current and future // J. Electron. Packag. 2004. V. 126, Iss. 4. P. 491–500. DOI: 10.1115/1.1839594
4. Дудинов К. В., Ипполитов В. М., Климова А. В., Пашковский А. Б., Самсонова И. В. Особенности тепловыделения в мощных полевых транзисторах // Радиотехника. 2007. № 3. С. 60–62.
5. Бережнова П. В., Лукашин В. М., Ратникова А. К., Пашковский А. Б. Оценка области нелокального тепловыделения в мощных гетероструктурных полевых транзисторах // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ–техника. 2007. Вып. 4 (492). С. 21–24.
6. Протасов Д. Ю., Малин Т. В., Тихонов А. В., Цацунчиков А. Ф., Журавлев К. С. Рассеяние электронов в гетероструктурах AlGaIn/GaN с двумерным электронным газом // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47, № 1. С. 36–47.
7. Абгарян К. К., Ревизников Д. Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56, № 1. С. 155–166. DOI: 10.7868/S004446691601004X
8. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Reviznikov D. L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures // Phys. status solidi (c). 2015. V. 12, N 4–5. P. 460–465. DOI: 10.1002/pssc.201400200

9. Дмитриев А. С. Введение в нанотеплофизику. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. 792 с.
10. Хвесюк В. И. Распространение тепла в многослойных наноструктурах // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42, Вып. 19. С. 20–25.
11. Хвесюк В. И., Скрябин А. С. Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, Вып. 3. С. 447–471. DOI: 10.7868/S0040364417030127
12. Cahill D. G., Ford W. K., Goodson K. E., Mahan G. D., Majumdar A., Maris H. J., Merlin R., Phillpot S. R. Nanoscale thermal transport // J. Appl. Phys. 2003. V. 93, N 2. P. 793–818. DOI: 10.1063/1.1524305
13. Chen G. Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons. Oxford University Press, 2005. 560 p.
14. Termentzidis K., Parasuraman J., Cruz C. A. D., Merabia S., Angelescu D., Marty F., Bourouina T., X. Kleber, Chantrenne P., Basset P. Thermal conductivity and thermal boundary resistance of nanostructures // Nanoscale Res. Lett. 2011. V. 6. P. 288 (10 pp). DOI: 10.1186/1556-276X-6-288
15. Madhusudana C. V. Thermal contact conductance. N.–Y.: Springer–Verlag, 1996. 168 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-3978-9
16. Samvedi V., Tomar V. The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si–Ge multilayered structures // Nanotechnology. 2009. V. 20, N 36. P. 365701. DOI: 10.1088/0957-4484/20/36/365701
17. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. М.: Эдиториал УРСС, 2004. 480 с.
18. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 280 с.
19. Абгарян К. К. Задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур // Известия вузов. Материалы электрон. техники. 2016. Т. 19, № 2. С. 108–114. DOI: 10.17073/1609-3577-2016-2-108-114
20. Абгарян К. К., Ревизников Д. Л. Вычислительные алгоритмы в задачах моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур. М.: МАКС Пресс, 2016. 120 с.
21. Воробьев Д. А., Хвесюк В. И. Метод расчета нестационарного нагрева наноструктур // Наука и образование. 2013. С. 541–550. DOI: 10.7463/0913.0617255
22. Sadao Adachi. Properties of Semiconductors Alloys: Group–IV, III–V and II–VI Semiconductors. John Wiley & Sons, 2009. 422 p. DOI: 10.1002/9780470744383

Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ по гранту 16–08–01178а.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2017, vol. 20, no. 3, pp. 213–219. DOI: 10.17073/1609-3577-2017-3-216-219

The inverse coefficient problem of heat transfer in layered nanostructures

K. K. Abgaryan^{1,2,*}, R. G. Noskov¹, D. L. Reviznikov^{1,2}

¹ *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Shosse, Moscow 125993, Russia*

² *Dorodnicyn Computing Centre, Federal Research Center «Computer Science and Control» of Russian Academy of Sciences,
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. The rapid development of electronics leads to the creation and use of electronic components of small dimensions, including nanoelements of complex, layered structure. The search for effective methods for cooling electronic systems dictates the need for the development of methods for the numerical analysis of heat transfer in nanostructures. A characteristic feature of energy transfer in such systems is the dominant role of contact thermal resistance at interlayer interfaces. Since the contact resistance depends on a number of factors associated with the technology of heterostructures manufacturing, it is of great importance to determine the corresponding coefficients from the results of temperature measurements. The purpose of this paper is to evaluate the possibility of reconstructing the thermal resistance coefficients at the interfaces between layers by solving the inverse problem of heat transfer. The complex of algorithms includes two major blocks — a block for solving the direct heat transfer problem in a layered nanostructure and an optimization block for solving the inverse problem. The direct problem was formulated in an algebraic

(finite difference) form under the assumption of a constant temperature within each layer, which is due to the small thickness of the layers. The inverse problem was solved in the extreme formulation, the optimization was carried out using zero-order methods that do not require the calculation of the derivatives of the optimized function. As a basic optimization algorithm, the Nelder—Mead method was used in combination with random restarts to search for a global minimum.

The results of the identification of the contact thermal resistance coefficients obtained in the framework of a quasi-real experiment are presented. The accuracy of the identification problem solution is estimated as a function of the number of layers in the heterostructure and the «measurements» error.

The obtained results are planned to be used in the new technique of multiscale modeling of thermal regimes of the electronic component base of the microwave range, when identifying the coefficients of thermal conductivity of heterostructure.

Keywords: heat transfer, layered nanostructure, heterostructure, contact thermal resistance coefficients, interface, inverse problem

References

1. Borisenko V. E., Vorob'eva A. I., Utkina E. A. *Nanoelektronika* [Nanoelectronics]. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy, 2009, 223 p. (In Russ.)
2. Vasileska D., Goodnick S. M., Goodnick S. *Computational electronics: semiclassical and quantum device modeling and simulation*. CRC Press, 2010, 782 p.
3. Chu R. C. The challenging of electronic cooling: past, current and future. *J. Electron. Packag.*, 2004, vol. 126, no. 4, pp. 491—500. DOI: 10.1115/1.1839594
4. Dudinov K. V., Ippolitov V. M., Klimova A. V., Pashkovsky A. B., Samsonova I. V. Features of heat release in high-power field-effect transistors on heterostructures. *Radiotekhnika = Radioengineering*, 2007, no. 3, pp. 60—62. (In Russ.)
5. Berezhnova P. V., Pashkovsky A. B., Ratnikova A. K., Lukashin V. M. Valuation of non-local heat generation area in power field-effect transistors on heterostructures. *Electronnaya Tekhnika. Series 1: SVCh—Tekhnika = Electronic Engineering. Ser. 1: Microwave Engineering*, 2007, no. 4, pp. 21—24. (In Russ.)
6. Protasov D. Y., Malin T. V., Tikhonov A. V., Zhuravlev K. S., Tsatsulnikov A. F. Electron scattering in AlGaIn/GaN heterostructures with a two-dimensional electron gas. *Semiconductors*, 2013, vol. 47, no. 1, pp. 33—44. DOI: 10.1134/S1063782613010181
7. Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Numerical simulation of the distribution of charge carrier in nanosized semiconductor heterostructures with account for polarization effects. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2016, vol. 56, no. 1, pp. 161—172. DOI: 10.1134/S0965542516010048
8. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Reviznikov D. L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures. *Phys. status solidi (c)*, 2015, vol. 12, no. 4–5, pp. 460—465. DOI: 10.1002/pssc.201400200
9. Dmitriev A. S. *Vvedenie v nanoteplofiziku [Introduction to nano-thermal physics]*. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy, 2015, 792 p. (In Russ.)
10. Khvesyuk V. I. Heat distribution in multilayer nanostructures. *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics Letters*, 2016, vol. 42, no. 19, pp. 20—25. (In Russ.)
11. Khvesyuk V. I., Skryabin A. S. Heat conduction in nanostructures. *High Temperature*, 2017, vol. 55, no. 3, pp. 434—456. DOI: 10.1134/S0018151X17030129
12. Cahill D. G., Ford W. K., Goodson K. E., Mahan G. D., Majumdar A., Maris H. J., Merlin R., Phillpot S. R. Nanoscale thermal transport. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, no. 2, pp. 793—818. DOI: 10.1063/1.1524305
13. Chen G. *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons*. Oxford University Press, 2005, 560 p.
14. Termentzidis K., Parasuraman J., Cruz C. A. D., Merabia S., Angelescu D., Marty F., Bourouina T., X. Kleber, Chantrenne P., Basset P. Thermal conductivity and thermal boundary resistance of nanostructures. *Nanoscale Res. Lett.*, 2011, vol. 6, p. 288 (10 pp.). DOI: 10.1186/1556-276X-6-288
15. Madhusudana C. V. *Thermal contact conductance*. New York: Springer-Verlag, 1996, 168 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-3978-9
16. Samvedi V., Tomar V. The role of interface thermal boundary resistance in the overall thermal conductivity of Si-Ge multilayered structures. *Nanotechnology*, 2009, vol. 20, no. 36, art. 365701. DOI: 10.1088/0957-4484/20/36/365701
17. Samarsky A. A., Vabishchevich P. N. *Chislennyye metody resheniya obratnykh zadach matematicheskoi fiziki* [Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics]. Moscow: Editorial URSS, 2004, 480 p. (In Russ.)
18. Alifanov O. M. *Obratnye zadachi teploobmena [Inverse problems of heat transfer]*. Moscow: Mashinostroenie, 1988, 280 p. (In Russ.)
19. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanoscale semiconductor heterostructures. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*, 2016, vol. 19, no. 2, pp. 108—114. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2016-2-108-114
20. Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. *Vychislitel'nyye algoritmy v zadachakh modelirovaniya i optimizatsii poluprovodnikovykh geterostruktur [Computational algorithms in problems of modeling and optimization of semiconductor heterostructures]*. Moscow: MAKS Press, 2016, 120 p. (In Russ.)
21. Vorob'ev D. A., Hvesyuk V. I. Calculation method for non-stationary heating of nano-structures. *Science and Education of Bauman MSTU*, 2013, pp. 541—550. (In Russ.). DOI: 10.7463/0913.0617255
22. Sadao Adachi. *Properties of Semiconductors Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. John Wiley & Sons, 2009, 422 p. DOI: 10.1002/9780470744383

Information about authors:

Karine K. Abgaryan^{1,2,§}: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Department (1,2) (kristal83@mail.ru); **Roman G. Noskov**¹: (noskovrg@gmail.com); **Dmitry L. Reviznikov**^{1,2}: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor (1), Leading Researcher (2) (reviznikov@inbox.com)

§ Corresponding author

Acknowledgments. The work is carried out with the financial support of the RFBR under grant 16-08-01178a.