

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2021. Т. 24, № 4. С. 217—221.
DOI: 10.17073/1609-3577-2021-4-217-221

УДК 621.315:536.2

Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе кремний — альфа-кварц для различных температур

© 2021 г. К. К. Абгарян^{1,2,✉}, И. С. Колбин¹

¹ Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия

² Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия

✉ Автор для переписки: kristal83@mail.ru

Аннотация. При рассмотрении тепловых процессов многослойных наноструктур существенная часть энергии рассеивается на границах слоев, для учета этого фактора при моделировании используется сопротивление Капицы. В работе проведен расчет термического сопротивления на границе Si/SiO₂ (альфа-кварц) структур для интервала температур до 567 К. Вычисления велись на основе моделей акустического и диффузного несоответствия. Полученные результаты, в частности, могут быть использованы при построении моделей теплопереноса в микроэлектронике.

Ключевые слова: сопротивление Капицы, термическое сопротивление, теплоперенос в наноструктурах

Благодарности: Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-01191А. Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Для цитирования: Абгарян К.К., Колбин И.С. Расчет сопротивления Капицы на интерфейсе кремний — альфа-кварц для различных температур. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 217—221. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-217-221>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

© 2021 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Calculation of the Kapitza resistance at the silicon — alpha-quartz interface for various temperatures

K. K. Abgaryan^{1,2,✉}, I. S. Kolbin¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia*

✉ *Corresponding author: kristal83@mail.ru*

Abstract. When considering the thermal processes of multilayer nanostructures, a significant part of the energy is dissipated at the boundaries of the layers; to take this factor into account, the Kapitza resistance is used in the simulation. In this study, we calculate the thermal resistance at the Si/SiO₂ interface (alpha-quartz) structures for the temperature range up to 567 K. The calculations are carried out based on the acoustic and diffuse mismatch models. The results obtained, in particular, can be used in constructing models of heat transfer in microelectronics.

Keywords: Kapitza resistance, thermal resistance, heat transfer in nanostructures

Acknowledgments: This study was supported by the Russian Foundation for Basic Research, grant No. 19–08–01191A. This study was carried out using the infrastructure of the Center for Collective Use “High-Performance Computing and Big Data” (CCU “Informatics”), Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS), Moscow.

For citation: Abgaryana K.K., Kolbina I.S. Calculation of the Kapitza resistance at the silicon–alpha quartz interface for various temperatures. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2021; 24(4): 217–221. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-217-221>

Введение

В последнее время отрасль микроэлектроники добилась больших успехов в росте электронных характеристик полупроводников. Однако, из-за увеличения удельной мощности и уменьшения размеров устройств, тепловыделение стало одним из самых важных проблем, ограничивающих производительность и надежность проектируемых систем [1, 2].

При рассмотрении устройств масштабом порядка длины свободного пробега носителя тепла (для полупроводников и диэлектриков это фононы — кванты колебательного движения атомов кристаллов) перенос тепла в основном определяется теплопроводностью на границах раздела между соседними материалами, а не внутренними свойствами материалов [3]. Количественное изменение температуры на границе определяется сопротивлением Капицы [4].

Точное вычисление термического сопротивления является весьма сложной задачей, с другой стороны в ряде случаев достаточно воспользоваться сравнительно простыми методами: моделями акустического и диффузного несоответствия. Первая основана на анализе переноса акустических волн

через интерфейс, а вторая на анализе переноса фононов через интерфейс [5].

В работе приведен расчет термического сопротивления для интерфейса Si/SiO₂ (альфа-кварц), такая граница возникает, в частности, при проектировании устройств с использованием технологии кремний на изоляторе (*Silicon on Insulator — SOI*).

Метод расчета

Для определения сопротивления Капицы на интерфейсе Si/SiO₂ воспользуемся формулой [6] (обозначение 1 → 2 показывает направление теплового потока: от первого материала (кремний) ко второму (альфа-кварц):

$$r_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{2} \left(\sum_j v_{1,j} \Gamma_{1,j} \int_0^{\omega_{D,1}} \hbar \omega \frac{dN_{1,j}(\omega, T)}{dT} d\omega \right), \quad (1)$$

$$N_{1,j}(\omega, T) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 v_{1,j}^3 \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1 \right]}, \quad (2)$$

$$\Gamma_{1,j} = \int_0^{\theta_c} \alpha_{1 \rightarrow 2}(\theta_1) \cos \theta \sin \theta d\theta, \quad (3)$$

где i — индекс материала (1 — Si, 2 — SiO₂); j — индекс ветви поляризации (1 — продольная, 2 и 3 — поперечные волны); $v_{i,j}$ — фоновая скорость i -го материала j -й ветви поляризации; $\hbar \approx 1,0545718 \times 10^{-34}$ Дж·с, постоянная Дирака; $k_B = 1,380649 \times 10^{-23}$ Дж/К, постоянная Больцмана; ω — угловая частота; $\omega_{D,i}$ — частота Дебая для i -го материала; T — температура; θ — угол между направлением распространения фононов и нормалью к интерфейсу; α — коэффициент переноса энергии упругими волнами.

Частота Дебая ω_D может быть получена из температуры Дебая T_D по формуле [7]:

$$\omega_D = \frac{k_B T_D}{\hbar}, \quad (4)$$

где температура Дебая T_D при этом может быть вычислена как [7]:

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n N_A \rho}{4\pi M} \right) v_m, \quad (5)$$

где $h = 6,62607 \cdot 10^{-34}$, постоянная Планка; n — число атомов в молекуле; $N_A = 6,02214076 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹, постоянная Авогадро; ρ — плотность; M — молярная масса; v_m — скорость звука.

Скорость звука приближенно может быть вычислена как [7]:

$$v_m \approx \left(\frac{1}{3} \left[\frac{2}{v_S^3} + \frac{1}{v_L^3} \right] \right)^{-1/3}, \quad (6)$$

где v_S — фоновая скорость поперечной волны (v_2, v_3); v_L — фоновая скорость продольной волны (v_1).

Стоит отметить, что, вообще говоря, плотность вещества зависит от температуры. Соответственно и температура Дебая и частота Дебая также зависимы от изменения температуры.

Расчет коэффициента α является весьма сложной задачей, например стоит отметить работу [8],

где задача решается через функцию Грина, однако на практике часто удовлетворительные результаты можно получить с помощью достаточно простых моделей акустического и диффузного несоответствия. Для акустического несоответствия коэффициент может быть вычислен как [9]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2}^A = \frac{4\rho_1 v_1 \rho_2 v_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(\rho_1 v_1 \cos \theta_1 + \rho_2 v_2 \cos \theta_2)^2}, \quad (7)$$

из соотношения $\frac{\sin \theta_1}{v_1} = \frac{\sin \theta_2}{v_2}$ (закон Снелла),

выразим θ_2 через θ_1 :

$$\theta_2 = \arcsin \left(\frac{v_2}{v_1} \sin \theta_1 \right). \quad (8)$$

При этом важно учесть, что для $v_1 < v_2$ существует критический угол θ_C , при котором для $\theta_1 > \theta_C$ параметр передачи обнуляется:

$$\theta_C = \arcsin \left(\frac{v_1}{v_2} \right). \quad (9)$$

Для модели диффузного несоответствия коэффициент переноса энергии не зависит от угла θ и имеет вид [5]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,j}^D = \frac{\sum_j v_{2,j}^{-2}}{\sum_{i,j} v_{i,j}^{-2}}, \quad (10)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,1}^D = \frac{v_{2,1}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2}}, \quad (11)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,2}^D = \frac{v_{2,1}^{-2} + v_{2,2}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2} + v_{1,2}^{-2} + v_{2,2}^{-2}}, \quad (12)$$

$$\alpha_{1 \rightarrow 2,3}^D = \frac{v_{2,1}^{-2} + v_{2,2}^{-2} + v_{2,3}^{-2}}{v_{1,1}^{-2} + v_{2,1}^{-2} + v_{1,2}^{-2} + v_{2,2}^{-2} + v_{1,3}^{-2} + v_{2,3}^{-2}}. \quad (13)$$

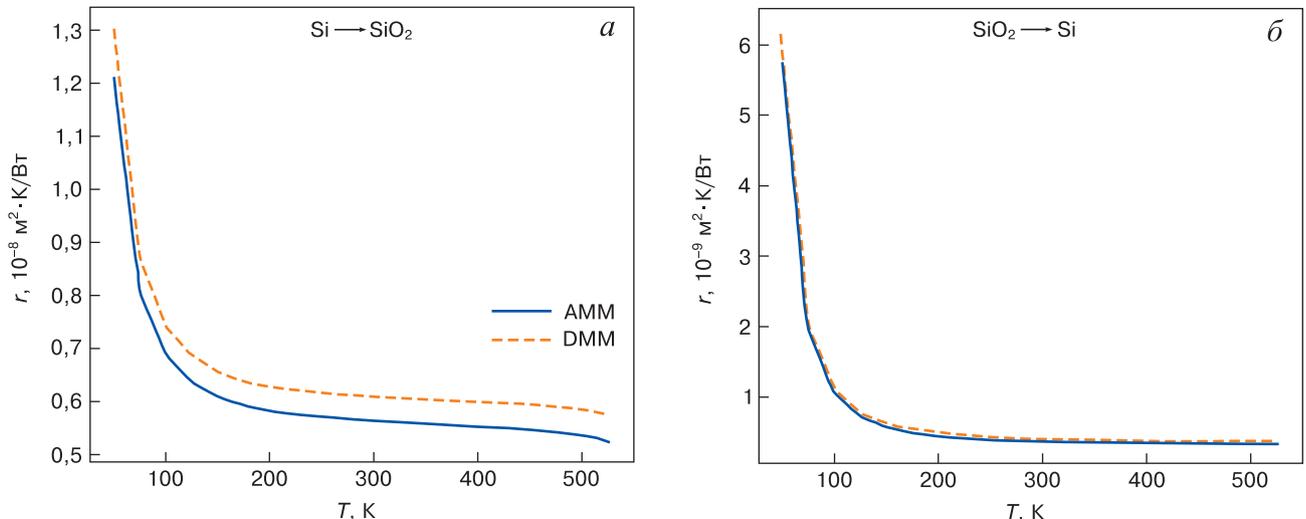


Рисунок. Зависимости термического сопротивления на границе Si/SiO₂ (а) и SiO₂/Si (б) от температуры
 Figure. Dependences of thermal resistance at the Si/SiO₂ (a) and SiO₂/Si (б) interface on temperature

Стоит также отметить, что данные модели, вообще говоря, можно использовать совместно [8]:

$$\alpha_{1 \rightarrow 2}^P = P\alpha_{1 \rightarrow 2}^A + (1-P)\alpha_{1 \rightarrow 2}^D, \quad (14)$$

где P — задаваемый параметр «зеркальности» интерфейса, изменяющийся в интервале от 0 до 1.

Результаты и их обсуждение

Данные для альфа-кварца взяты из работы [10], промежуточные значения вычислены с помощью В-сплайна. Зависимости скоростей акустических волн для ветвей поляризации для кремния от температуры получены из [11], зависимость плотности от температуры получена из работы [12]. Проведен расчет термического сопротивления на основе моделей акустического (АММ) и диффузного (ДММ) несоответствия, результат представлен на рисунке для направлений Si/SiO₂ (а) и SiO₂/Si (б).

По полученным данным видно, что в зависимости от направления значения отличаются существенно: приблизительно в 2 раза в области низких температур и более чем на порядок в области нормальных и высоких.

Для сравнения можно привести работу [13], где авторы с использованием методов неравновесной молекулярной динамики получили для 300 К значение термического сопротивления $2,96 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$. В публикации [14] с использованием молекулярной динамики получено значение $4,27 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$, в статье [15] дается теоретическое значение термического сопротивления $6,88 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$. При этом, в настоящей работе значения для 300 К: $5,63 \cdot 10^{-9}$ и $6,082 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{К}/\text{Вт}$ для моделей акустического и диффузного несоответствия, что говорит об адекватной точности используемых моделей.

Заключение

В статье было рассчитано термическое сопротивление на интерфейсе кремний–альфа кварц на основе моделей акустического и диффузного рассогласования. Продемонстрировано, что в зависимости от направления теплового потока сопротивление Капицы для данных материалов существенно варьируется: для Si/SiO₂ разница может достигать от 2 до более чем 10 раз. Полученные результаты могут представлять интерес при построении моделей теплопереноса в микроэлектронике на основе технологии кремний на изоляторе.

Библиографический список

1. Хвесюк В.И., Скрыбин А.С. Теплопроводность наноструктур. *Теплофизика высоких температур*. 2017; 55(3): 446—471. <https://doi.org/10.7868/S0040364417030127>
2. Абгарян К.К., Колбин И.С. Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов. *Известия вузов. Материалы электронной техники*. 2019; 22(3): 190—196. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-190-196>
3. Хвесюк В.И., Лю Б., Баринов А.А. Новый подход к расчету проводимости Капицы между твердыми телами. *Письма в журнал технической физики*. 2020; 46(19): 42—46. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.19.50045.18367>
4. Kapitza P. The study of heat transfer in helium II. *Journal of Physics USSR*. 1941; 4(1–6): 181—210.
5. Swartz E.T., Pohl R.O. Thermal boundary resistance. *Reviews of Modern Physics*. 1989; 61(3): 605—668. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>
6. Szymański M. Calculation of the cross-plane thermal conductivity of a quantum cascade laser active region. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011; 44(8): 085101. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/8/085101>
7. Anderson O.L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1963; 24(7): 909—917. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(63\)90067-2](https://doi.org/10.1016/0022-3697(63)90067-2)
8. Zhao H., Freund J.B. Phonon scattering at a rough interface between two FCC lattices. *Journal of Applied Physics*. 2009; 105(1): 013515—013515. <https://doi.org/10.1063/1.3054388>
9. Prasher R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts. *Applied Physics Letters*. 2009; 94(4): 041905—041905. <https://doi.org/10.1063/1.3075065>
10. Ohno I., Harada K., Yoshitomi C. Temperature variation of elastic constants of quartz across the α - β transition. *Physics and Chemistry of Minerals*. 2006; 33: 1—9. <https://doi.org/10.1007/s00269-005-0008-3>
11. Nikanorov S.P., Burenkov Yu.A., Stepanov A.V. Elastic properties of silicon. *Soviet Physics – Solid State*. 1971; 13(10): 2516—2519.
12. Endo R., Fujihara Y., Susa M. Calculation of the density and heat capacity of silicon by molecular dynamics simulation. *High Temperatures – High Pressures*. 2003; 35/36(5): 505—511. <https://doi.org/10.1068/htjr135>
13. Deng B., Chernatynskiy A., Khafizov M., Hurley D.H., Phillpot S.R. Kapitza resistance of Si/SiO₂ interface. *Journal of Applied Physics*. 2014; 115: 084910. <https://doi.org/10.1063/1.4867047>
14. Lampin E., Nguyen Q.-H., Francioso P.A., Cleri F. Thermal boundary resistance at silicon–silica interfaces by molecular dynamics simulations. *Applied Physics Letters*. 2012; 100(13): 131906. <https://doi.org/10.1063/1.3698325>
15. Shichen Deng, Chengdi Xiao, Jiale Yuan, Dengke Ma, Junhui Li, Nuo Yang, Hu He. Thermal boundary resistance measurement and analysis across SiC/SiO₂ interface. *Applied Physics Letters*. 2019; 115(10): 101603. <https://doi.org/10.1063/1.5111157>

References

1. Khvesyuk V.I., Skryabin A.S. Thermal conductivity of nanostructures. *High Temperature*. 2017; 55(3): 428—450. <https://doi.org/10.1134/S0018151X17030129>
2. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Calculation of the effective thermal conductivity of a superlattice based on the Boltzmann transport equation using first-principle calculations. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(3): 190—196. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-3-190-196>
3. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. A new approach to calculation of the Kapitza conductance between solids. *Technical Physics Letters*. 2020; 46(10): 983—987. <https://doi.org/10.1134/S1063785020100065>
4. Kapitza P. The study of heat transfer in helium II. *Journal of Physics USSR*. 1941; 4(1–6): 181—210.
5. Swartz E.T., Pohl R.O. Thermal boundary resistance. *Reviews of Modern Physics*. 1989; 61(3): 605—668. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>
6. Szymański M. Calculation of the cross-plane thermal conductivity of a quantum cascade laser active region. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011; 44(8): 085101. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/8/085101>
7. Anderson O.L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1963; 24(7): 909—917. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(63\)90067-2](https://doi.org/10.1016/0022-3697(63)90067-2)
8. Zhao H., Freund J.B. Phonon scattering at a rough interface between two FCC lattices. *Journal of Applied Physics*. 2009; 105(1): 013515—013515. <https://doi.org/10.1063/1.3054383>
9. Prasher R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts. *Applied Physics Letters*. 2009; 94(4): 041905—041905. <https://doi.org/10.1063/1.3075065>
10. Ohno I., Harada K., Yoshitomi C. Temperature variation of elastic constants of quartz across the α - β transition. *Physics and Chemistry of Minerals*. 2006; 33: 1—9. <https://doi.org/10.1007/s00269-005-0008-3>
11. Nikanorov S.P., Burenkov Yu.A., Stepanov A.V. Elastic properties of silicon. *Soviet Physics – Solid State*. 1971; 13(10): 2516—2519.
12. Endo R., Fujihara Y., Susa M. Calculation of the density and heat capacity of silicon by molecular dynamics simulation. *High Temperatures – High Pressures*. 2003; 35/36(5): 505—511. <https://doi.org/10.1068/htjr135>
13. Deng B., Chernatynskiy A., Khafizov M., Hurley D.H., Phillpot S.R. Kapitza resistance of Si/SiO₂ interface. *Journal of Applied Physics*. 2014; 115: 084910. <https://doi.org/10.1063/1.4867047>
14. Lampin E., Nguyen Q.-H., Francioso P.A., Cleri F. Thermal boundary resistance at silicon-silica interfaces by molecular dynamics simulations. *Applied Physics Letters*. 2012; 100(13): 131906. <https://doi.org/10.1063/1.3698325>
15. Shichen Deng, Chengdi Xiao, Jiale Yuan, Dengke Ma, Junhui Li, Nuo Yang, Hu He. Thermal boundary resistance measurement and analysis across SiC/SiO₂ interface. *Applied Physics Letters*. 2019; 115(10): 101603. <https://doi.org/10.1063/1.5111157>

Информация об авторах / Information about the authors

Абгарян Каринэ Карленовна — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; зав. кафедрой, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Колбин Илья Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия; e-mail: iskolbin@gmail.com

Karine K. Abgaryan — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Chief Researcher, Head of Department, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; Head of Department, Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russia; <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>; e-mail: kristal83@mail.ru

Ilya S. Kolbin — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Researcher, Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russia; e-mail: iskolbin@gmail.com

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 11.01.2022; принята к публикации 21.01.2022
Received 24 December 2021; Revised 11 January 2022; Accepted 21 January 2022