

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ /
MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS**

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023. Т. 26. № 3. С. 190—197.

DOI: 10.17073/1609-3577j.met202303.538

УДК 536.2.01, 536.21, 539.219.3

**Принципиально новые подходы к решению
теплофизических задач применительно к нанoeлектронике**© 2023 г. В. И. Хвесюк¹, А. А. Баринов^{1,✉}, Б. Лю^{1,2}, В. Цяо^{1,3}

¹ *Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет),
2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, Москва, 105005, Российская Федерация*

² *Университет Цинхуа, район Хайдянь, Пекин, 100084, Китай*

³ *Компания «Технологии зеленой энергетики LONGi»,
ул. Восточный Чанъань, № 401, Сиань, 710100, Китай*

✉ Автор для переписки: barinov@bmstu.ru

Аннотация. В настоящее время наблюдается интенсивное развитие теплофизики твердых тел, связанное с необходимостью создания моделей, обладающих высокой степенью предсказательной надежности получаемых результатов. В работе представлены новые подходы к решению ряда актуальных задач, связанных с изучением переноса тепла в полупроводниках и диэлектриках, в основном, касающихся наноструктур. Первая из рассмотренных задач — создание статистической модели процессов взаимодействия переносчиков тепла — фононов — с шероховатыми поверхностями твердых тел. В основе разработанного метода впервые применена статистика наклонов профиля случайной поверхности. Результатами расчета являются длины пробегов фононов между противоположными границами образца, которые необходимы для расчета эффективной теплопроводности в баллистическом и диффузионно-баллистическом режимах теплопереноса в зависимости от параметров шероховатости. Вторая задача — развитие методов расчета процессов переноса тепла через поверхности контакта твердых тел, имеющих различные теплофизические свойства. Удалось показать, что при учете дисперсии фононов и соответствующих ограничений на значения частот, модифицированная модель акустического несоответствия для расчета сопротивлений Капицы может быть распространена на температуры выше 300 К. Ранее пределом применимости этого метода считалась температура 30 К. Также проведено обобщение предложенного метода на случай шероховатых интерфейсов. Третья задача — новый подход к определению теплопроводности твердых тел. Авторами развит метод прямого Монте-Карло моделирования кинетики фононов со строгим учетом их взаимодействия за счет непосредственного использования законов сохранения энергии и квазиимпульса. Проведенные расчеты коэффициента теплопроводности для чистого кремния в диапазоне температур от 100 до 300 К показали хорошее согласие с экспериментом и расчетами других авторов, а также позволили в деталях рассмотреть кинетику фононов.

Ключевые слова: фононы, наноструктуры, эффективная теплопроводность, граничное термическое сопротивление

Для цитирования: Хвесюк В.И., Баринов А.А., Лю Б., Цяо В. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к нанoeлектронике. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2023; 26(3): 190—197. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202303.538>

Fundamentally new approaches to solving thermophysical problems in the field of nanoelectronics

V. I. Khvesyuk¹, A. A. Barinov¹✉, B. Liu^{1,2}, W. Qiao^{1,3}

¹ *Bauman Moscow State Technical University,
5–1 2-ya Baumanskaya Str., Moscow 105005 Russian Federation*

² *Tsinghua University, Haidian District, Beijing 100084, P.R. China*

³ *LONGi Green Energy Technology Co., Ltd., 401 East Chang'an Str., Xi'an 710100, P.R. China*

✉ Corresponding author: barinov@bmstu.ru

Abstract. Currently, there is a rapid development of thermophysics of solids associated with the need of creating models with a high degree of predictive reliability. This paper presents new approaches to solving relevant issues related to the study of heat transfer in semiconductors and dielectrics, mainly concerning nano-structures. The first of the considered tasks is the creation of a statistical model of the processes of interaction of heat carriers – phonons – with rough surfaces of solids. For the first time authors proposed a method based on the statistics of the slopes of the profile of a random surface. The calculation results are the mean free paths of phonon between the opposite boundaries of the sample, which are necessary for calculating the effective thermal conductivity in ballistic and diffusion-ballistic regime of heat transfer, depending on the roughness parameters. The second task is to develop methods for calculating the processes of heat transfer through the contact surfaces of solids. We were able to show that, taking into account the phonon dispersion and the corresponding restrictions on the frequency values, the modified acoustic mismatch model for calculating Kapitza resistances can be extended to temperatures above 300 K. Previously, the limit of applicability of this method was considered to be a temperature of 30 K. Moreover, the proposed method is also generalized to the case of rough interfaces. The third task is a new approach to determining the thermal conductivity of solids. The authors have developed a method of direct Monte Carlo simulation of phonon kinetics with strict consideration of their interaction due to the direct use of the laws of conservation of energy and quasi-momentum. The calculations of the thermal conductivity coefficient for pure silicon in the temperature range from 100 to 300 K showed good agreement with the experiment and *ab initio* calculations of other authors, and also allowed us to consider in detail the kinetics of phonons.

Keywords: phonons, nanostructures, effective thermal conductivity, thermal boundary resistance

For citation: Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Liu B., Qiao W. Fundamentally new approaches to solving thermophysical problems in the field of nanoelectronics. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2023; 26(3): 190—197. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202303.538>

Введение

Изучение процессов переноса энергии в наномасштабных электрических схемах с высоким удельным тепловыделением — большой, сложный и очень важный круг задач, решение которых совершенно необходимо в ближайшем будущем [1, 2]. Однако в этой исключительно важной области до сих пор имеется ряд «белых пятен» в фундаментальных направлениях, что тормозит развитие как новой теплофизики, так и, собственно, нано-

электроники [3]. В работе рассматриваются три проблемы, связанные с кинетикой фононов в полупроводниках и диэлектриках.

Проблема 1. Учет взаимодействия переносчиков тепла с границами твердых тел в наноструктурах

Первая проблема — взаимодействие переносчиков тепла с границами твердых тел в наноструктурах — очень своеобразная, не имеющая аналогов

© 2023 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.

в классической теплофизике. В силу ее новизны, это — пока что мало разработанная область исследований. Существо ее заключается в необходимости изучения влияния шероховатых поверхностей на перенос тепла в наноструктурах [4]. Очевидно, что это возможно только при качественном моделировании неровной поверхности, что пока полностью отсутствует в существующих подходах. Без такого моделирования невозможно грамотно описать процессы рассеяния фононов на поверхностях, а значит, и их влияние на интенсивность переноса тепла. Эксперименты показывают, что шероховатость в принципе оказывает существенное влияние на продольную теплопроводность наноструктур, при этом теплопроводность становится зависящей от параметров шероховатой поверхности: среднеквадратичных высоты σ и интервала корреляции l_{cor} шероховатостей и их отношения σ/l_{cor} [5]. В связи с этим особый интерес представляет постановка задач, в которых основную роль играют именно взаимодействия фононов с поверхностями.

В работе рассматривается задача такого рода — продольная теплопроводность тонких пленок, толщины которых меньше длин пробега фононо-фононных взаимодействий при отсутствии всех остальных взаимодействий. Задача решается в двумерном приближении. Ниже последовательно излагаются составляющие задачи, которые следует учитывать, чтобы получить достаточно полное решение.

Первая составляющая — описание шероховатости поверхностей твердых тел. Оно необходимо для получения картины рассеяния фононов на реальных поверхностях. Хорошо известно, что такие

поверхности задаются статистически [6]. В данной работе впервые используется подход к описанию шероховатого профиля путем задания наклонов отдельных шероховатостей. Исходным является модель двумерной случайной гауссовой поверхности $z = \zeta(x, y)$, которая характеризуется двумя средними величинами: среднеквадратичной шероховатостью σ и длиной (интервалом) корреляции l_{cor} . При этом, в отличие от широко известных методов [7, 8], используется плотность распределения не для высот профиля z , а для градиентов $n = |\nabla \zeta|$ наклона профиля [6]:

$$w_n(n, \gamma) = \frac{1}{\gamma} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{n^2}{2\gamma^2}\right), (0 \leq n < \infty) \quad (1)$$

где γ — дисперсия первой производной $(\zeta')^2 \equiv \gamma^2$, определяемая по выражению $\gamma = \sigma/l_{\text{cor}}$. Однако при анализе задач о рассеянии фононов, в отличие от традиционных задач, изучающих дифракцию отраженных от поверхности волн [6], удобнее использовать угол φ наклона касательной к профилю: $n = \tan \varphi$, т. е. функцию $w_n(\varphi, \gamma)$. На рис. 1 приводится визуализация распределения (1) для разных значений среднеквадратичных отклонений γ углов наклона профиля φ_γ : 2°, 5°, 10° и 15°. Обратим внимание, что правило трех сигм позволяет для заданного γ определить диапазон углов $\varphi_{3\gamma}$, охватывающий 99,73 % возможных случайных значений наклонов профиля.

Вторая составляющая — анализ локальных взаимодействий фононов с шероховатостями. На этом этапе определяется рассеяние фононов шероховатыми поверхностями внутрь твердого тела в зависимости от частот, температур и углов

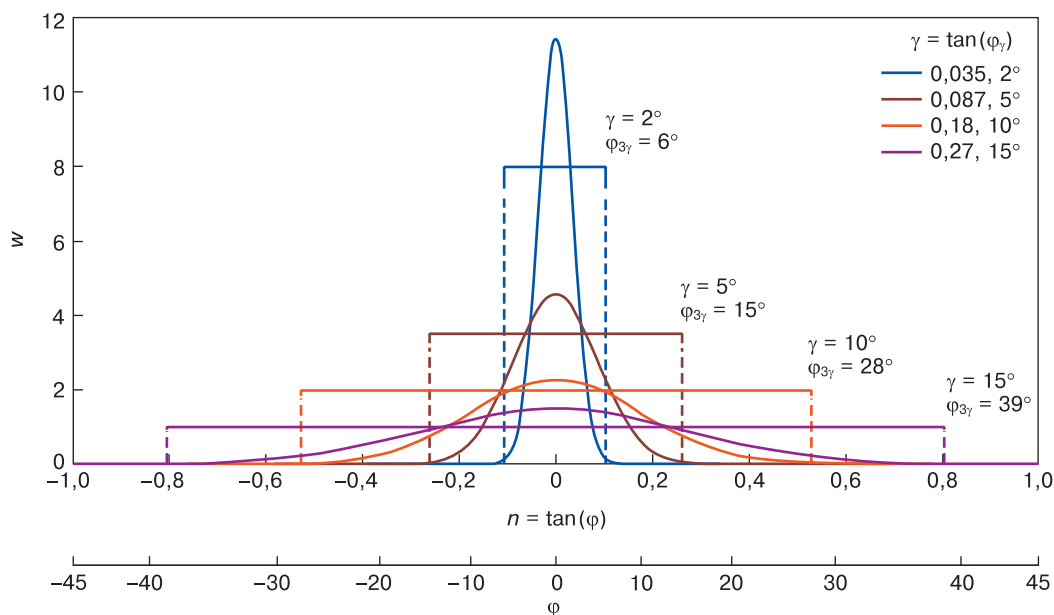


Рис. 1. Распределение производной нормальной случайной функции для разных значений среднеквадратичных отклонений γ углов наклона профиля φ

Fig. 1. Distribution of the derivative of the normal random function for different values of the root-mean-square deviations γ of the profile angles φ

падения на поверхности твердых тел. Вводятся углы падения θ_0 и отражения от шероховатости θ фононов относительно нормали к средней линии профиля. Простой анализ показывает, что эти углы связаны с углом наклона профиля φ следующим образом: $\theta = \theta_0 + 2\varphi$. Заметим, что в данной работе рассматриваются профили поверхности, где отсутствуют теневые зоны [6].

Третья составляющая — определение длин пробега фононов между последовательными взаимодействиями со стенками. Это удобнее определять в условиях, когда имеет место баллистический перенос фононов между поверхностями пленки, тогда длина свободного пробега от одной поверхности пленки до другой может быть выражена как

$$l_b(\theta_0, \varphi) = \frac{L_z}{\cos[\theta(\theta_0, \varphi)]},$$

где L_z — толщина пленки.

Затем, с помощью функции распределения $w_n(\varphi, \gamma)$, определяли усредненную по φ величину l_b :

$$\langle l_b(\theta_0, \gamma) \rangle = \frac{\int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} l_b(\theta_0, \varphi) w_n(\varphi, \gamma) d\varphi}{\int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} w_n(\varphi) d\varphi}. \quad (2)$$

Здесь пределы интегрирования φ_{\min} и φ_{\max} определяются по правилу трех сигм, представленному на рис. 1. На рис. 2 рассмотрены результаты расчета средних длин свободного пробега по формуле (2), выраженных в безразмерных единицах:

$$b_s = \frac{\langle l_b(\theta_0, \gamma) \rangle}{L_z}, \text{ называемых форм-фактором.}$$

Форм-фактор b_s имеет достаточно простую и наглядную интерпретацию — он показывает, во сколько раз длина свободного пробега фононов в баллистическом режиме превосходит толщину образца L_z . Так, при движении фононов по нормали к поверхности длина пробега l_b ограничена толщиной образца L_z , а при скользких углах отражения наблюдается значительный рост длины пробега в b_s -раз. Обратим внимание, что в классической теории учета рассеяния на границе, величина b_s определяется для предельного случая полностью диффузного отражения и составляет 1,115 вне зависимости от шероховатости поверхности [9].

Приведенная модель расчета средних длин свободного пробега (2) необходима для определения продольной теплопроводности нанопленок [9] в зависимости от характеристик профиля шероховатой поверхности — отношения среднеквадратичной шероховатости и длины корреляции, $\gamma = \sigma/l_{\text{кор}}$, что является принципиальной особенностью данного метода.

Проблема 2. Изучение переноса энергии через контактные поверхности

При протекании тепла через контактные поверхности между различными материалами происходит частичное рассеяние падающей энергии, в результате которого возникает разность температур на границах контакта двух тел. Это явление, открытое в 1941 г. П.Л. Капицей [10], называется тепловым граничным сопротивлением или сопротивлением Капицы. Закон переноса тепла в этих случаях записывается так:

$$q = h_K(T_1 - T_2), \quad (3)$$

где h_K — коэффициент проводимости Капицы — величина обратная тепловому граничному сопротивлению; q — тепловой поток; T_1, T_2 — температуры.

В условиях нанoeлектроники при размерах элементов цепи порядка или меньше фонов-фонов длин свободного пробега сопротивления Капицы вносят основной вклад в общее тепловое сопротивление системы. Поэтому очень важно разработать надежные методы расчета процессов переноса через интерфейсы. В данной работе расчет сопротивления проводится на основе анализа взаимодействия упругих волн с интерфейсом — метод, впервые предложенный И.М. Халатниковым [11]. Главным недостатком этой теории до недавнего времени считалось то, что результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными только в области температур не выше 30—50 К. Ранее авторами показано [12],

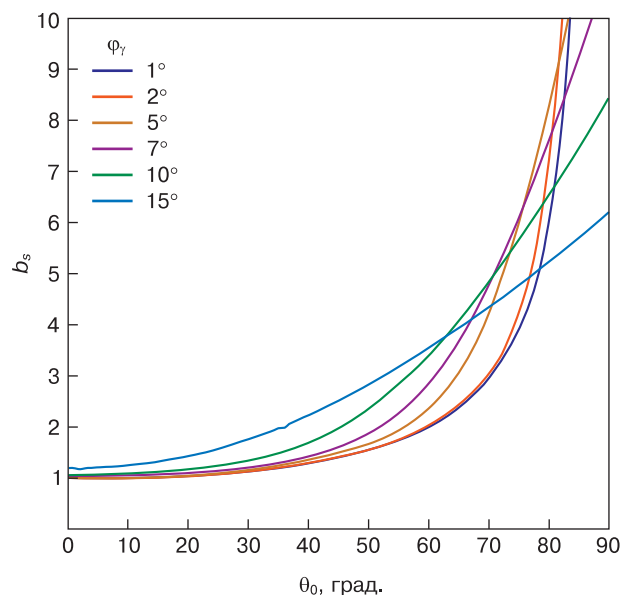


Рис. 2. Зависимость форм-фактора b_s от угла падения θ_0 и среднеквадратичных углов наклона профиля φ_γ

Fig. 2. The dependence of the form-factor b_s on the angle of incidence θ_0 and the standard angles of inclination of the profile φ_γ

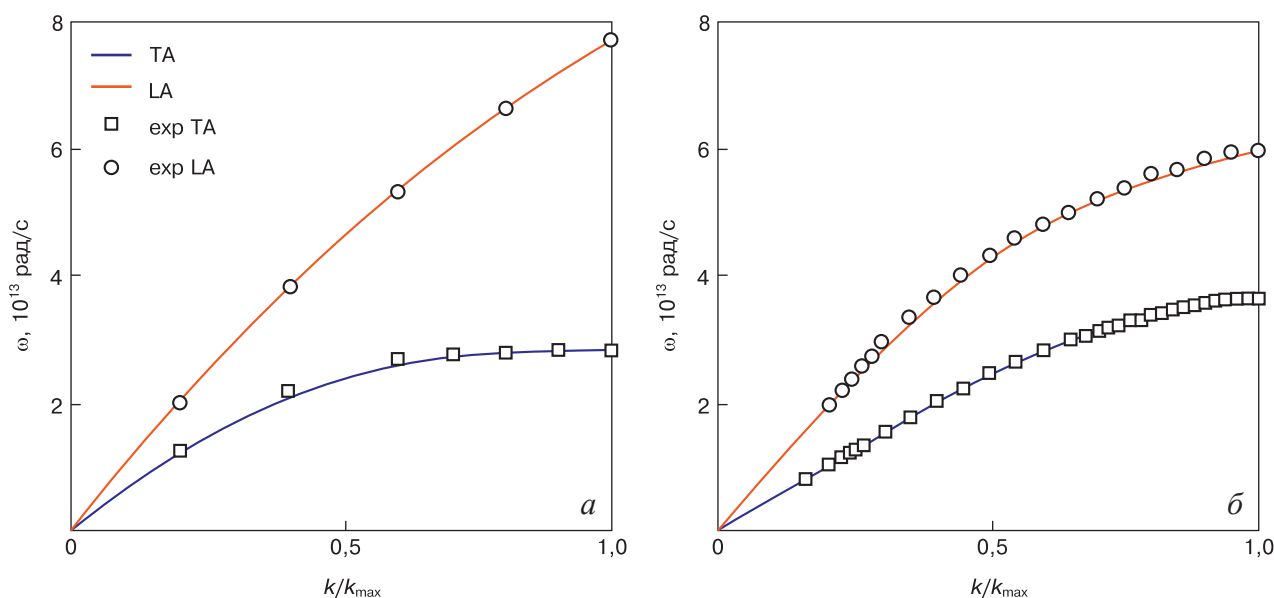


Рис. 3. Дисперсионные соотношения кремния (а) и алюминия (б) вдоль направления [100]. Сплошные и пунктирные линии представляют собой продольные и поперечные акустические моды соответственно. Экспериментальные данные показаны кружками [13] и квадратами [14]

Fig. 3. Dispersion relations of silicon (a) and aluminum (б) along the direction [100]. Solid and dotted lines represent longitudinal and transverse acoustic modes, respectively. Experimental data are shown by circles [13] and squares [14]

что причина этого существенного ограничения на область применения модели теплового контактного сопротивления заключается в использованных допущениях при описании модели упругих волн. Так, в рамках классической теории упругости, считается, что скорость волны постоянна, и не зависит от частоты волны. В этом случае имеет место линейная зависимость частоты ω от волнового вектора \mathbf{k} . До сих пор был широко распространен именно этот подход.

Авторами данной работы была рассмотрена более строгая модель, учитывающая гармонические колебания кристаллических решеток контактирующих материалов. В рамках этой теории

скорость распространения твердых тел зависит от частоты волны. На рис. 3 приведены дисперсионные кривые для кремния и алюминия, полученные методом полиномиальной интерполяции [9] экспериментальных данных [13, 14]. На рис. 4 представлены результаты расчета проводимости Капицы для гладкой границы контакта алюминий–кремний (Al/Si) в соответствии с моделью авторов [12]. Сопоставление с экспериментальными данными [15] показывает хорошее совпадение вплоть до температуры 300 К.

Второе направление исследований процессов переноса тепла через границы контакта — учет шероховатостей контактных поверхностей [16].

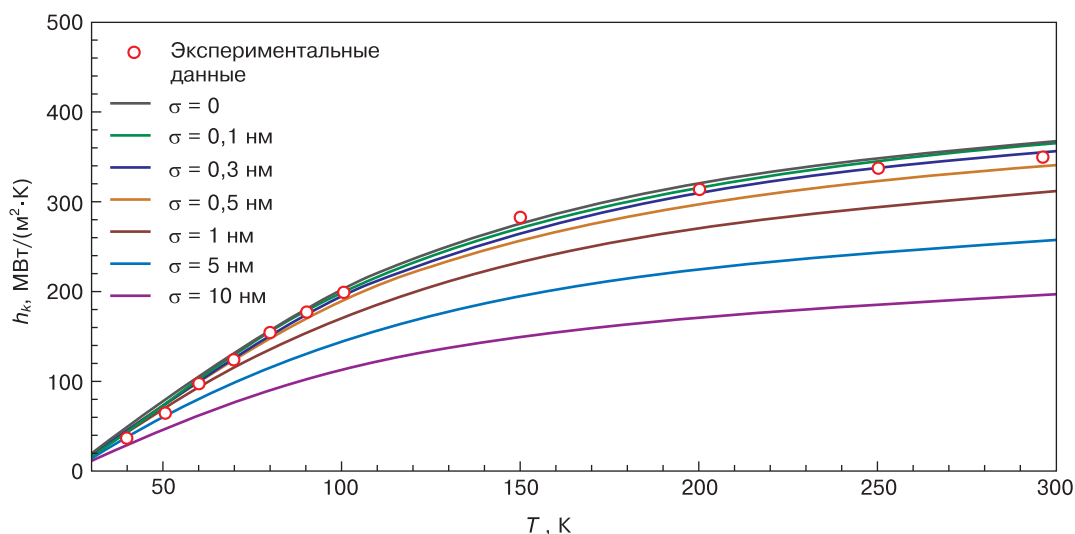


Рис. 4. Проводимость Капицы границы раздела Al/Si в зависимости от температуры для гладкого интерфейса и с средне-квадратичной шероховатостью 0,1, 0,3, 0,5, 1, 5 и 10 нм. Точки соответствуют экспериментальным данным [15]

Fig. 4. Kapitza conductivity of the Al/Si interface as a function of temperature for a smooth interface and with a mean square roughness of 0.1, 0.3, 0.5, 1, 5 and 10 nm. The points correspond to the experimental data [15]

В основе разработанного метода лежит обобщение подхода к расчету проводимости Капицы для гладких (идеальных) границ контакта [13] на случай шероховатых границ за счет статистического учета наклонов реального профиля поверхности, представленного в проблеме 1. Результаты расчета проводимости Капицы на границе раздела Al/Si с различной величиной среднеквадратичной шероховатости σ , представлены на рис. 4. Из рис. 4 видно, что при увеличении σ от 0,1 до 10 нм (в области атомарной шероховатости) наблюдается уменьшение проводимости Капицы почти в 2 раза.

Проблема 3. Новый подход к определению теплопроводности твердых тел

Здесь речь идет о теплопроводности полупроводников и диэлектриков. Это значительно более сложная проблема, чем теплопроводность классических газов, которая определяется с помощью решения уравнения Больцмана. Оно было получено в 1872 г. именно для описания свойств газов. Сложность связана с двумя обстоятельствами. Во-первых, перенос тепла в твердых телах осуществляется фононами — квазичастицами с нулевой массой, процессы взаимодействия которых друг с другом значительно более сложные, чем взаимодействия атомов классических газов. Во-вторых, атомы классических газов движутся независимо друг от друга, за исключением очень коротких интервалов времени, когда они взаимодействуют друг с другом. Атомы твердых тел находятся в постоянном взаимодействии друг с другом, испытывая колебания. При этом, как известно, они образуют упорядоченные решетки различной структуры, от чего зависит характер колебаний, и, в конечном счете, такие свойства фононного газа, как, например, дисперсия и времена жизни фононов. Поэтому при расчете теплопроводности необходимо учитывать большое количество атомов и связанных с ними колебаний.

В силу указанной сложности до недавнего времени использовались полуэмпирические модели, что нельзя считать удовлетворительным, особенно, если речь идет о наноструктурах, для которых мы имеем очень скудные экспериментальные данные. В связи с этим, в конце двадцатого — начале двадцать первого веков велась напряженная работа по созданию методов расчета теплопроводности «из первых принципов» (*ab initio*), когда в качестве исходных используются квантово-механические параметры системы и не используются эмпирические данные [17].

Еще одна особенность — наряду с транспортным уравнением Больцмана развиты различные методы решения этой задачи, в том числе, не использующие уравнение Больцмана (например,

методы функции Грина, молекулярной динамики, Грина—Кубо).

При решении уравнения Больцмана используется полное время релаксации, учитывающее все типы взаимодействия фононов. Представляет интерес метод, который учитывал бы отдельно различные типы взаимодействий с решением уравнений сохранения энергии и квазиимпульсов, как это делается в методе Чепмена—Энскога при решении уравнения Больцмана для классических газов. Это позволило бы получить более точные сведения о роли различных типов фононов и процессов их взаимодействия в теплопроводности. Кроме того, это обеспечивает четкое разделение N - и U -процессов (нормальных процессов и процессов переброса), которое, по определению, зависит от результата сложения квазиимпульсов фононов при их слиянии.

В этой работе авторами рассматривается метод определения теплопроводности, который минует уравнение Больцмана. Решение получено для чистого Si²⁸, аналогично [17], т. е. с учетом только фонон-фононных взаимодействий. Суть предложенного метода заключается в следующем. Методом Монте-Карло решается задача, аналогичная задаче, которая для классических газов называется «самодиффузией», из которой определяется коэффициент диффузии $D(T)$ [18, 19]. Тогда можно оценить величину коэффициента теплопроводности при известной теплоемкости $C(T)$:

$$k(T) = C(T)D(T). \quad (4)$$

Пример определения теплопроводности таким способом известен [20]. Но в работе [20] теплопроводность определялась через время релаксации. А в нашем методе существенным является то, что тип взаимодействия фононов (слияние/распад, упругие/неупругие процессы) и свойства фононов (с учетом дисперсии) строго определяются в результате совместного решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса [19].

Для верификации предложенной модели на рис. 5 представлено сопоставление результатов расчета для чистого кремния Si²⁸ с расчетами, полученными методом *ab initio* [17], а также экспериментальные данные [21].

Следующий этап — определение долей N - и U -процессов (P_N и P_U), получаемых из анализа всего процесса диффузии фононов путем прямого подсчета их количества. Так, в области температур от 100 до 300 К эти доли приблизительно постоянны, и равны: $P_N = 0,6$, $P_U = 0,4$. Это позволяет оценить реальные значения времен — чем больше доля, тем меньше время жизни фононов или больше интенсивность появления новых фононов. Еще один результат — доли различных типов взаимодействий [19]. Эти данные получены впервые, так как другие

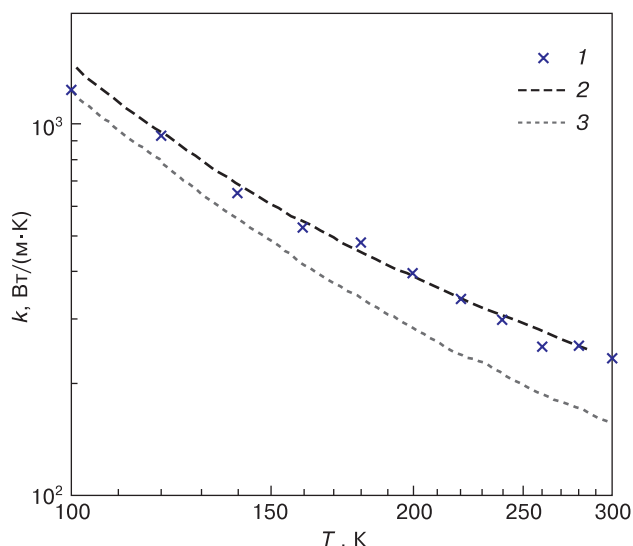


Рис. 5. Зависимость коэффициента теплопроводности кремния от температуры: 1 — расчеты авторов; 2 — результаты моделирования *ab initio* [17]; 3 — аппроксимация экспериментальных данных [21]

Fig. 5. Dependence of the coefficient of thermal conductivity of silicon on temperature: (1) authors' calculations, (2) *ab initio* modeling results [17], (3) approximation of experimental data [21]

методы не позволяют определять доли различных процессов и различных типов взаимодействий.

Заключение

В работе рассмотрены три актуальные задачи моделирования переноса тепла в структурах нано- и мезомасштаба. Первая задача посвящена учету рассеяния переносчиков тепла — фононов — на реальных (шероховатых) поверхностях твердых тел. Авторами впервые предложена модель, согласно которой рассматриваются именно наклоны профиля в каждой точке шероховатой

поверхности, заданной с помощью функции нормального распределения. Это позволило свести задачу рассеяния фононов на границе к задаче статистического усреднения углов падения — отражения от шероховатого профиля. В качестве примера рассмотрен случай, когда длина пробега фонона порядка и меньше среднеквадратичной шероховатости поверхности, а профиль поверхности не содержит теневых зон. Тогда решение задачи не зависит от свойств материала и в безразмерной форме сводится к форм-фактору, характеризующему уменьшение длины пробега фононов в зависимости от среднеквадратичной шероховатости поверхности образца.

Вторая задача — развитие модели граничного термического сопротивления. Во-первых, показано, что при учете дисперсии фононов контактирующих материалов и соответствующего ограничения на спектр фононов модифицированная модель акустического несоответствия (**ММАН**) может быть применена для расчета сопротивления Капицы вплоть до температур 300 К и выше, а не 30 К, как считалось ранее. Во-вторых, проведено обобщение ММАН на случай шероховатых границ раздела путем применения модели рассеяния фононов на статистически случайной поверхности, изложенной при решении первой задачи.

Третья задача посвящена развитию методов прямого Монте-Карло моделирования кинетики фононов. Авторами предложен численный алгоритм расчета теплопроводности решетки твердого тела (полупроводников и диэлектриков), основанный на непосредственном использовании законов сохранения энергии и квазиимпульса фононов. В качестве примера проведены расчеты теплопроводности для чистого кремния в диапазоне температур от 100 до 300 К, которые показали хорошее согласие с экспериментом и расчетами *ab initio*.

Библиографический список / References

1. 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. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93(2): 793—818. <https://doi.org/10.1063/1.1524305>
2. Cahill D.G., Braun P.V., Chen G., Clarke D.R., Fan Sh., Goodson K.E., Keblinski P., King W.P., Mahan G.D., Majumdar A., Maris H.J., Phillpot S.R., Pop E., Shi Li Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012. *Applied Physics Reviews*. 2014; 1(1): 011305. <https://doi.org/10.1063/1.4832615>
3. Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Liu B., Qiao W. A review to the specific problems of nano thermal physics. *Journal of Physics: Conference Series*. 2020; 1683(2): 022073. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1683/2/022073>
4. Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021; 2057: 012111. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2057/1/012111>
5. Lim J., Hippalgaonkar K., Andrews S.C., Majumdar A., Yang P. Quantifying surface roughness effects on phonon transport in silicon nanowires. *Nano Letters*. 2012; 12(5): 2475—2482. <https://doi.org/10.1021/nl3005868>
6. Bass F.G., Fuks I.M. Wave scattering from statistically rough surfaces. Vol. 93. *International Series in Natural Philosophy*. Amsterdam: Elsevier; 2013. 540 p.
7. Soffer S.B. Statistical model for the size effect in electrical conduction. *Journal of Applied Physics*. 1967; 38(4): 1710—1715. <https://doi.org/10.1063/1.1709746>

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на III-й Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г. (Хвесюк В.И., Баринов А.А., Лю Б., Цяо В. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к наноэлектронике. М.: МАКС Пресс, 2021. С. 92—94. <https://doi.org/10.29003/m2481.MMMSEC-2021/92-94>).

8. Maznev A.A. Boundary scattering of phonons: Specularity of a randomly rough surface in the small-perturbation limit. *Physical Review B*. 2015; 91(13): 134306. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.134306>
9. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I., Zhang K. Updated model for thermal conductivity calculation of thin films of silicon and germanium. *Physics of Atomic Nuclei*. 2020; 83(10): 1538—1548. <https://doi.org/10.1134/S1063778820100038>
10. Kapitza P.L. The study of heat transfer in helium II. *Journal of Physics (USSR)*. 1941; 4(1–6): 181—210.
11. Халатников И. М. Теплообмен между твердым телом и гелием II. Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1952; 22(6): 687—704.
- Khalatnikov I. M. Heat transfer between solids and Helium—II. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1952; 22(6): 687—704. (In Russ.)
12. Liu B., Khvesyuk V.I. Analytical model for thermal boundary conductance based on elastic wave theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020; 159: 120117. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120117>
13. Weber W. Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and α -Sn. *Physical Review B*. 1977; 15(10): 4789—4803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.15.4789>
14. Gilat G., Nicklow R.M. Normal vibrations in aluminum and derived thermodynamic properties. *Physical Review*. 1966; 143(2): 487—494. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.143.487>
15. Minnich A.J., Johnson J.A., Schmidt A.J., Esfarjani K., Dresselhaus M.S., Nelson K.A., Chen G. Thermal conductivity spectroscopy technique to measure phonon mean free paths. *Physical Review Letters*. 2011; 107(9): 095901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.095901>
16. Liu B., Khvesyuk V.I., Barinov A.A. The modeling of the Kapitza conductance through rough interfaces between solid bodies. *Physics of the Solid State*. 2021; 63(7): 1128—1133. <https://doi.org/10.1134/S1063783421070155>
17. Tütüncü H.M., Srivastava G.P. Lattice dynamics of solids, surfaces, and nanostructures. *Length-Scale Dependent Phonon Interactions. Topics in Applied Physics*. Vol. 128. New York: Springer; 2014. 294 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-8651-0_1
18. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. The effect of phonon diffusion on heat transfer. *Journal of Physics: Conference Series*. 2019; 1385: 012046. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1385/1/012046>
19. Хвесюк В.И., Цяо В., Баринов А.А. Определение теплопроводности кремния с детальным учетом кинетики взаимодействия фононов. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. 2022; (3(102)): 57—68. <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-3-57-68>
- Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. Kinetics of phonon interaction taken into account in determining thermal conductivity of silicon. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*. 2022; (3(102)): 57—68. (In Russ.). <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-3-57-68>
20. Kukita K., Kamakura Y. Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation. *Journal of Applied Physics*. 2013; 114(15): 154312. <https://doi.org/10.1063/1.4826367>
21. Inyushkin A.V., Taldenkov A.N., Gibin A.M., Gusev A.V., Pohl H.-J. On the isotope effect in thermal conductivity of silicon. *Physica Status Solidi (C)*. 2004; 1(11): 2995—2998. <https://doi.org/10.1002/pssc.200405341>

Информация об авторах / Information about the authors

Хвесюк Владимир Иванович — доктор техн. наук, профессор кафедры теплофизики, Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, Москва, 105005, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7267-0930>; e-mail: khvesyuk@bmstu.ru

Баринов Александр Алексеевич — канд. техн. наук, доцент кафедры теплофизики, Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, Москва, 105005, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6607-1536>; e-mail: barinov@bmstu.ru

Лю Бинь — канд. техн. наук, ассистент исследователя в ведущей лаборатории теплотехники и энергетики при Министерстве образования и центра гибких электронных технологий, Университет Цинхуа, район Хайдянь, Пекин, 100084, Китай; e-mail: liubinbmstu@gmail.com

Цяо Вэньпей — канд. техн. наук, ведущий инженер научно-исследовательского центра, Компания «Технологии зеленой энергетики LONGi», ул. Восточный Чанъань, № 401, Сиань, 710100, Китай; e-mail: qiaowenpei@longi.com

Vladimir I. Khvesyuk — Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Department of Thermophysics, Bauman Moscow State Technical University, 5–1 2–ya Baumanskaya Str., Moscow 105005, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7267-0930>; e-mail: khvesyuk@bmstu.ru

Alexander A. Barinov — Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor of the Department of Thermal Physics, Bauman Moscow State Technical University, 5–1 2–ya Baumanskaya Str., Moscow 105005, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6607-1536>; e-mail: barinov@bmstu.ru

Bin Liu — Cand. Sci. (Eng.), Research Assistant of Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education and Center for Flexible Electronics Technology, Tsinghua University, Haidian District, Beijing 100084, P.R. China; e-mail: liubinbmstu@gmail.com

Wenpei Qiao — Cand. Sci. (Eng.), Chief Engineer of R&D Center, LONGi Green Energy Technology Co., Ltd., No. 401 East Chang'an Str., Xi'an 710100, P.R. China; e-mail: qiaowenpei@longi.com

Поступила в редакцию 16.03.2023; поступила после доработки 19.07.2023; принята к публикации 17.08.2023

Received 16 March 2023; Revised 19 July 2023; Accepted 17 August 2023