

# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

2

1. Произвести обзор современных тенденций по моделям теплопереноса в многослойных структурах
2. Разработать физико-математическую оптимизационную модель теплопереноса в многослойных полупроводниковых наноструктурах;
3. Применить разработанную оптимизационную модель к изучению процессов теплопереноса в арсенид галлиевых структурах типа AlAs/GaAs
4. Сравнить результаты моделирования с данными, полученными из экспериментов и с помощью пакетных приложений.







# ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

## ТЕПЛОПЕРЕНОС – БАЗИРУЕТСЯ

НА ТРЕХ ВИДАХ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ;

- ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ
- КОНВЕКЦИЯ
- ИЗЛУЧЕНИЕ

## ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

–ПЕРЕНОС ТЕПЛА

ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ ОТ ЧАСТИЦ С БОЛЬШЕЙ ЭНЕРГИЕЙ ЧАСТИЦАМ С МЕНЬШЕЙ ЭНЕРГИЕЙ ПРИ НЕПОСРЕДСТВЕННОМ КОНТАКТЕ ГОРЯЧИХ ЧАСТЕЙ СИСТЕМЫ С ХОЛОДНЫМИ

## ГЕТЕРОСТРУКТУРА –

СТРУКТУРА, ОБРАЗОВАННАЯ СОВОКУПНОСТЬЮ НЕСКОЛЬКИХ ГЕТЕРОПЕРЕХОДОВ (С РАЗМЕРОМ ДО НЕСКОЛЬКИХ ДЕСЯТКОВ НАНОМЕТРОВ)

## ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ $A^3 B^5$

– СХОДНЫЕ ПО СТРУКТУРЕ, Т.Е. ИМЕЮЩИЕ ОДИНАКОВЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ РЕШЕТКИ С БЛИЗКИМИ ПО ЗНАЧЕНИЮ ПЕРИОДАМИ, И СВОЙСТВАМИ, СПОСОБНЫЕ ОБРАЗОВЫВАТЬ МЕЖДУ СОБОЙ ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ

## ФОНОНЫ

ОГРАНИЧЕННЫЕ В ПРОСТРАНСТВЕ ВОЛНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ РЕШЕТКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА, ТИПА ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА ВЕЩЕСТВА

$E_v$  – ВАЛЕНТНАЯ ЗОНА, ОБРАЗОВАВШАЯСЯ В ХОДЕ РАСЩЕПЛЕНИЯ УРОВНЕЙ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

$E_c$  – ЗОНА ПРОВОДИМОСТИ, СЛЕДУЮЩАЯ ЗА ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ, И СЧИТАЮЩАЯСЯ ЗОНОЙ РАЗРЕШЕННЫХ ЭНЕРГИЙ

$E_g$  – ЗАПРЕЩЕННАЯ ЗОНА, РАСПОЛОЖЕННАЯ МЕЖДУ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ  $E_v$  И ЗОНОЙ ПРОВОДИМОСТИ  $E_c$

## СВЕРХРЕШЕТКА –

ТВЕРДОТЕЛЬНАЯ ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА, В КОТОРОЙ НАРЯДУ С ПОТЕНЦИАЛОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ДЕЙСТВУЕТ ВСТРОЕННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ. – ОДНОМЕРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ  $V(z)$ , ПЕРИОД КОТОРОГО  $d$  МЕНЬШЕ ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ЭЛЕКТРОНОВ, НО БОЛЬШЕ ПОСТОЯННОЙ РЕШЕТКИ  $a$

## ГЕТЕРОПЕРЕХОД – ПОД

НИМ БУДЕМ ПОНИМАТЬ КОНТАКТ ДВУХ РАЗЛИЧНЫХ ПО ХИМИЧЕСКОМУ СОСТАВУ ПОЛУПРОВОДНИКОВ, ПРИ КОТОРОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА ОДНОГО МАТЕРИАЛА БЕЗ НАРУШЕНИЯ ПЕРИОДИЧНОСТИ ПЕРЕХОДИТ В РЕШЕТКУ ДРУГОГО МАТЕРИАЛА

## ПОЛУПРОВОДНИКИ

ПОЛУПРОВОДНИКИ – ВЕЩЕСТВА, КОТОРЫЕ ПО СВОЕЙ УДЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ЗАНИМАЮТ ПРОМЕЖУТОЧНОЕ МЕСТО МЕЖДУ ПРОВОДНИКАМИ И ДИЭЛЕКТРИКАМИ И ОТЛИЧАЮТСЯ ОТ ПРОВОДНИКОВ СИЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ УДЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСЕЙ, ТЕМПЕРАТУРЫ И РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ИЗЛУЧЕНИЯ

# ПЕРЕНОС ТЕПЛА - ОСОБЕННОСТИ НАНОМИРА

- происходит замена классических моделей процесса на квантовые, базирующиеся на основе законов квантовой механики (уравнение Шредингера);
- начальные составляющие части системы, такие как электрон, дырка, экситон и иные, а также сама система из атомов могут быть описаны волновой функцией, зависящей от переменных, которые определяют степень свободы системы и которая может рассматриваться как амплитуда вероятности обнаружения частицы в установленных координатах и временном факторе.

НАНОМИР – ОБЪЕКТЫ, РАЗМЕР КОТОРЫХ НЕ ПРЕВЫШАЕТ 100НМ  
(1НМ =  $10^{-9}$ М)  
(ПРИРОДНЫЕ И ПОЛУЧЕННЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И НАПРАВЛЕННОГО ИЗГОТОВЛЕНИЯ)

## ПРОСТЫЕ ОБЪЕКТЫ:

- НАНОТОЧКИ(0-ОБЪЕКТЫ)
- НАНОМОСТИКИ(1D-ОБЪЕКТЫ И КВАЗИ – 1D- ОБЪЕКТЫ)
- НАНОСТЕНКИ(2D-ОБЪЕКТЫ)
- НАНОЧАСТИЦЫ(ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ, МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ)
- НАНОПРОВОЛОКИ
- НАНОТРУБКИ
- НАНОКЛАСТЕРЫ
- НАНАОСЫ
- НАНОАЗОРЫ И НАНОНАПОРЫ

## БОЛЕЕ СЛОЖНЫЕ ОБЪЕКТЫ:

- НАНОПРОВОЛОКИ С ПОКРЫТИЯМИ
- СВЕРХРЕШЕТКИ
- НАНОТРУБКИ С НАНОЧАСТИЦАМИ ВНУТРИ
- СЛОЖНЫЕ НАНОПРОВОЛОКИ
- НАНОКОМПОЗИТЫ
- НАНОЖИДКОСТИ
- НАНОПЫЛЬ

## КОНТАКТНЫЕ СТРУКТУРЫ:

- КОНТАКТЫ НАНОПРОВОЛОКА-НАНОТРУБКА
- КОНТАКТЫ НАНОЧАСТИЦА-НАНОПРОВОЛОКА, НАНОЧАСТИЦА-НАНОТРУБКА
- КОНТАКТЫ НАНОПРОВОЛОК РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ
- КОНТАКТЫ НАНОИГЛ С ПОДЛОЖКАМИ
- КОНТАКТЫ НАНОСТРУКТУР ЧЕРЕЗ ЖИДКОСТИ

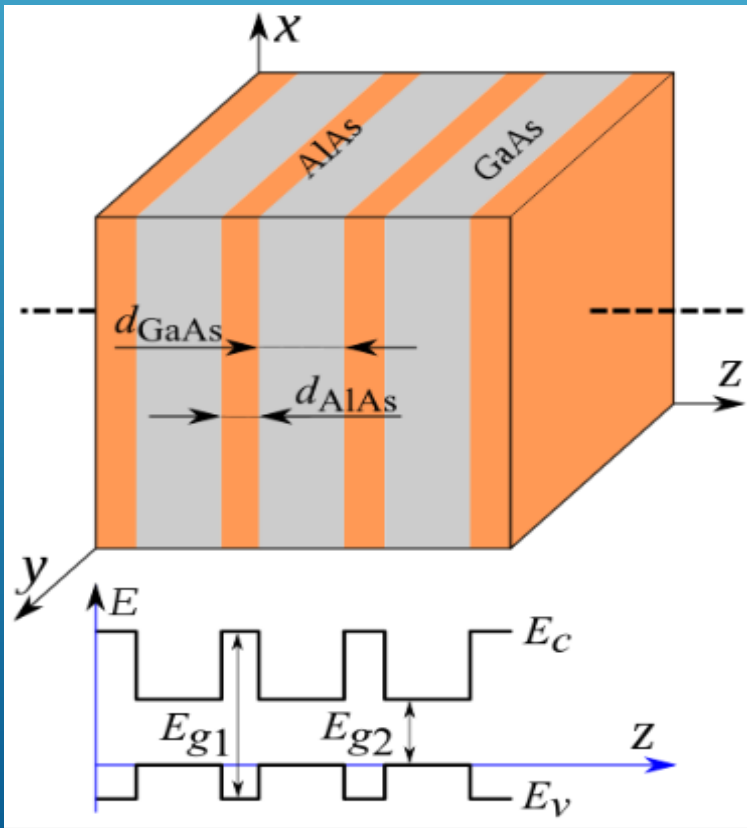
## СЛОЖНЫЕ СТРУКТУРЫ(НАНОУСТРОЙСТВА):

- НАНОТРАНЗИСТОРЫ
- ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ НАНОЛАЗЕРЫ
- СИСТЕМЫ ЗАПИСИ И ЧТЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ С НАНОРАЗМЕРАМИ
- НАНОТЕРМОРЕЗИСТОРЫ
- НАНОТЕРМОМИКРОСКОПЫ

## ► МНОГОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ - СВЕРХРЕШЕТКИ

Сверхрешетка GaAs/AlAs и профиль дна зоны проводимости и верха валентной зоны перпендикулярно слоям сверхрешетки.

$E_{g1}$  и  $E_{g2}$  - ширины запрещенной зоны свехрешетки



При осуществлении контакта двух полупроводников, имеющих разную ширину запрещенной зоны  $E_{g1}$  и  $E_{g2}$  устанавливается термодинамическое равновесие. В таком состоянии уровень Ферми является единым.

Граница гетероперехода – важная составляющая часть гетероструктур- в ее пределах происходит изменение свойств полупроводникового материала (структура энергетических зон, эффективные массы носителей заряда и их подвижность)

# МОДЕЛЬ КОЛЛУЭЯ

## МОДЕЛЬ КОЛЛУЭЯ

Модель используется для нахождения теплопроводности для объемного материала.

В модели Коллуэя применяется решение уравнения Больцмана в приближении времени релаксации.

Недостаток модели : учитываются только нормальные процессы между фононами (нельзя обеспечить конечную величину теплопроводности)

Выражение теплопроводности имеет вид:

$$\lambda = [k_B / (2\pi^2 \nu)] (k_B T / \hbar)^3 (I_1 + I_2^2 / I_3),$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $= 1,380649 \cdot 10^{-23}$  Дж/к;

$\hbar$  – постоянная Дирака  $= h / 2\pi$ , где  $h$  – постоянная Планка;

$\nu$  – скорость звука в кристалле;  $I_1$   $I_2$   $I_3$  – токнко

$$I_1 = \int_0^{\theta_{D_S}/T} \tau_c \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi$$

$$I_2 = \int_0^{\theta_{D_S}/T} \tau_c / \tau_N \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi$$

$$I_3 = \int_0^{\theta_{D_S}/T} (1 - \tau_c / \tau_N) \tau_N^{-1} \xi^4 \exp(\xi) [\exp(\xi) - 1]^{-1} d\xi$$

## ВРЕМЕНА РЕЛАКСАЦИИ

$\tau_c$  – комбинированное время релаксации;

$\tau_N$  – время релаксации по нормальным процессам рассеивания;

$$\tau_c^{-1} = \tau_U^{-1} + \tau_N^{-1} + \tau_i^{-1} + \tau_b^{-1}$$

$\tau_U$  – время релаксации за счет процессов с перебросом;

$\tau_i$  – время релаксации за счет процессов рассеивания на примесях, неоднородностях, дефектах;

$\tau_b$  – время релаксации при рассеивании на границах.

## НЕОБХОДИМОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ МОДЕЛИ КОЛЛУЭЯ\

чтобы получить теплопроводность конечной величины следует произвести модификацию модели Коллуэя, приняв во внимание резистивные процессы рассеивания, протекающие с потерей импульса, т.е. процессы с перебросом.

# ВЫБОР МОДЕЛИ

Физико-математическая модель теплопереноса в многослойных полупроводниковых наноструктурах  
(заимствована модель из работ \* и \*\*)

Уравнение Больцмана для фононов

$$\vec{v}_s \cdot \nabla f_s(\vec{k}) = \left[ \frac{\partial f_s(\vec{k})}{\partial t} \right]_{st}$$

где  $v_s$  – скорость звука;  $f_s(\vec{k})$  – функция распределения фононов,  $s$  – й ветки;  $\vec{k}$  – волновой вектор; индекс  $st$  означает «со столкновениями»

$$\vec{v}_s \cdot \frac{\partial f_s(\vec{k})}{\partial T} \cdot \nabla T = - \frac{f_s^0(\vec{k}) - f_s(\vec{k})}{\tau_s^*(\vec{k})}$$

где индекс  $s$  означает продольные акустические (LA) и поперечные (ТА) фононы,  $f_s^0$  – равновесная функция распределения;  $\tau_s^*(\vec{k}) = (1 + \beta/\tau_{N_s})\tau_s$

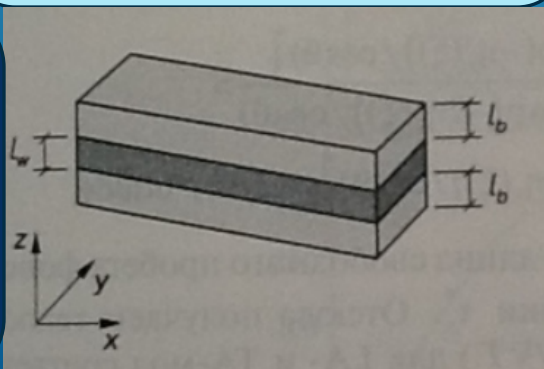
Проведем исследование теплопроводности внутреннего слоя, который лежит в границах от  $z=0$  до  $z=l_w$ , где  $l_w$  – толщина слоя

В случае внутреннего слоя градиент температуры направлен вдоль оси  $x$ . Тогда, уравнение Больцмана для фононов, принимает вид

$$v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_s^0(\vec{k})}{\partial T} + v_{sz} \frac{\partial \delta f_s(\vec{k})}{\partial z} + \frac{\delta f_s(\vec{k})}{\tau_s^*} = 0 \quad (1)$$

где  $v_{sx}$ ,  $v_{sz}$  – скорости фононов по осям  $x$  и  $z$  соответственно,  $f_s^0$  – равновесная функция распределения.

ДВУМЕРНАЯ  
ГЕТЕРОСТРУКТУРА;  
ВНУТРЕННИЙ СЛОЙ  
ТОЛЩИНОЙ  $l_w$  И  
ДВА БАРЬЕРНЫХ  
ОДИНАКОВОЙ  
ТОЛЩИНЫ  $l_b$



# ВЫБОР МОДЕЛИ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

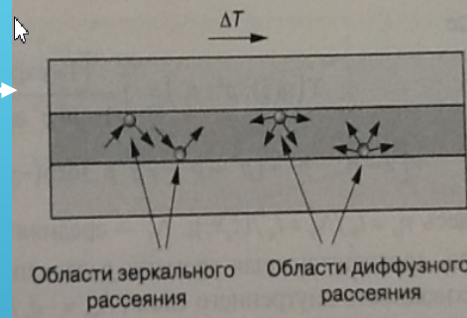
Представим гетероструктуру в своем базовом состоянии как структуру, имеющую три слоя: внутренний слой шириной  $l_w$  и находящийся между двумя барьерными слоями, имеющими одинаковую толщину  $l_b$

$$\delta f_{\vec{k},s}(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \{1 + \psi(\vec{v}_{\vec{k},s}) \exp[-z/(\tau_s^* v_{sz})]\} \quad (2)$$

где  $\psi$  — является некоторой функцией.

Вводим параметры рассеивания  $p^+, p^-$ , показывающие вероятность зеркального отражения от верхней и нижней границы. Значения  $(1 - p^+)$ ,  $(1 - p^-)$  показывают вероятности отражения от указанных границ диффузионно

## Схема распространения фононов



$$\delta f_{\vec{k},s}^+(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* \cdot v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \Theta^+(p^+, p^-, v_{sz}) \quad (v_{sz} > 0);$$

$$\delta f_{\vec{k},s}^-(\vec{v}_{\vec{k},s}, z) = -\tau_s^* \cdot v_{sx} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial f_{\vec{k},s}^0}{\partial T} \Theta^-(p^+, p^-, v_{sz}) \quad (v_{sz} < 0);$$

где,

$$\Theta^+(p^+, p^-, v_{sz}) = 1 - \left[ \frac{(1 - p^-) + p^-(1 - p^+) \exp(-l_w/\tau_s^* v_{sz})}{1 - p^+ p^- \exp(-2 l_w/\tau_s^* v_{sz})} \right] \exp[(-z)/(\tau_s^* v_{sz})] \quad (3)$$

$$\Theta^-(p^+, p^-, v_{sz}) = 1 - \left[ \frac{(1 - p^+) + p^+(1 - p^-) \exp(l_w/\tau_s^* v_{sz})}{1 - p^+ p^- \exp(2 l_w/\tau_s^* v_{sz})} \right] \exp[(l_w - z)/(\tau_s^* v_{sz})]$$



$$q_s = -\frac{1}{l_w} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{Ds}/T} \frac{\tau_s^*}{\nu_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} d\xi \cdot I(p^+, p^-, \eta(\xi))$$

где,

$$I(p^+, p^-, \eta(\xi)) = \int_0^{l_w} dz \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi \int_0^{\pi/2} \Theta^+ \sin^3 \theta d\theta + \int_{\pi/2}^{\pi} \Theta^- \sin^3 \theta d\theta$$

(4)

где  $\phi$  – азимутальный угол;  $\theta$  – полярный угол.

ПОДСТАВЛЯЯ В  
УРАВНЕНИЕ  
ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ  
Ф-И (3) И (4)  
ПОЛУЧИМ

$$q_s = -\frac{4\pi}{3} \frac{\partial T}{\partial x} \frac{k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{Ds}/T} \frac{\tau_s^*}{\nu_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

$$\gamma(\eta(\xi), p^+, p^-) = \int_0^{\pi/2} \frac{[1 - \exp(-\eta_s(\xi) / \cos \theta)]}{1 - p^+ p^- \exp(-2\eta_s(\xi) / \cos \theta)} \times$$

$$\times [2 - p^+ - p^- + (p^+ + p^- - 2p^+ p^-) \exp(-\eta_s(\xi) / \cos \theta)] \cos \theta \sin^3 \theta d\theta d\phi$$

Здесь  $\eta_s = l_w / \Lambda_s^* = l_w / (\tau_s^* \nu_s)$  – средняя длина свободного пробега фононов, соответствующая времени релаксации  $\tau_s^*$

## ВЫБОР МОДЕЛИ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

Отсюда получаем теплопроводность внутреннего слоя ( $\lambda_{ws} = -\vec{q}_s/\nabla T$ ) для LA- и TA-мод соответственно:

$$\lambda_{ws} = \frac{k_B}{6\pi^2} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_{Ds}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

Вводя дебаевскую плотность числа состояния фононов  $D_s^D = \omega^2/(2\pi^2 - v_s^2)$  перепишем последнюю формулу как:

$$\lambda_{ws} = \frac{1}{3} \left(\frac{k_B}{\hbar}\right) k_B T \int_0^{\theta_{Ds}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} \cdot D_s^D \cdot [1 - (3/4) \gamma(\eta(\xi), p^+, p^-)] d\xi$$

Общую теплопроводность, полученную от вклада всех поляризаций (одна продольная – LA и две поперечные – TA) можно записать в виде  $\lambda_w = \lambda_{wLA} + \lambda_{wTA}$ . Отметив, что если  $p^+, p^- > 1$ ,  $(1 - (3/4) \gamma) > 1$ , приходим к выражению для теплопроводности объемного тела

$$\lambda_o = \sum_s \frac{1}{3} \frac{k_B}{\hbar} k_B T \int_0^{\theta_{Ds}/T} \frac{\tau_s^*}{v_s} \frac{\xi^4 \exp(\xi)}{[\exp(\xi) - 1]^2} D_s^D d\xi$$

\* H. P. Ziambaras E., Phonon knudsen flow in nanostructured semiconductor systems, Journal Applied Physics, 99.054303.2006.

\*\* А.С. Дмитриев, Введение в нанотеплофизику, Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.

## ОБЗОР ПОДХОДОВ К МОДЕЛЯМ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

ТЕМА СТАТЬИ	«Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов» (Известия вузов) (2)	«Расчет теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах» (НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ, Известия вузов) (1)	«Обратная коэффициентная задача теплопереноса в слоистых наноструктурах» (Известия вузов, материалы электронной техники)
АВТОРЫ	К.К. Абгарян; И.С. Колбин	К.К. Абгарян; И.С. Колбин	К.К. Абгарян; Р.Г. Носков; Д.Л. Ревизников
ГОД	2019	2018	2017
МЕТОД РЕШЕНИЯ	модель модального подавления, аппроксимирующая решение кинетического уравнения Больцмана для фононов.	модель, в которой распределение тепла предполагалось постоянным внутри слоя, при этом температура ступенчато изменялась на интерфейсах слоев	восстановление коэффициентов термического сопротивления на границах соприкосновения слоев, изготовленных из разных материалов, с помощью решения обратной задачи теплопереноса
ИССЛЕДУЕМЫЙ МАТЕРИАЛ	AlAs/GaAs	AlAs/GaAs	AlAs/GaAs
КОЛИЧЕСТВО СЛОЕВ	Структуры с периодом в 1, 2, 3, 6, 10, 17, 25, 40 монослоев	N= 1000	От 2 до 5 слоев
ПО	almaBTE		Не указано

# АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ МОДЕЛИ ПО ОБЗОРАМ РАБОТ

13

Рассмотрим иные подходы к моделированию процесса теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах на примере работ

Выбранная модель	модель работы	Модель статьи 2	Модель статьи 1
Основной базовый принцип	БАЗОВОЕ УРАВНЕНИЕ - УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА С ПРЕОБРАЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ КОЛЛУЭЯ И УЧЕТОМ КНУДСОНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ ФОНОНВ	МОДЕЛЬ МОДАЛЬНОГО ПОДАВЛЕНИЯ, АППРОКСИМИРУЮЩАЯ РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА	МОДЕЛЬ, ПРЕДПОЛАГАЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛА ВНУТРИ СЛОЯ ПОСТОЯННЫМ, ПРИ ЭТОМ ТЕСПЕРАТУРА СТУПЕНЧАТО ИЗМЕНЯЛАСЬ НА ИНТЕРФЕЙСАХ СЛОЕВ
Достоинства	В ПОЛНОМ ОБЪЕМЕ РАССМОТРЕНЫ МЕХАНИЗМЫ РАССЕЯНИЯ АККУСТИЧЕСКИХ ФОНОНВ ВНУТРИ СЛОЯ : КАК ЗАРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ ТАК И ДИФФУЗНОЕ	ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ПОЗВОЛЯЮТ ЛЕГКО НАХОДИТЬ ДИСПЕРСИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ И ПАРАМЕТРЫ РАССЕИВАНИЯ (данные получены из открытой библиотеки проекта ALMA) МОДЕЛЬ ОБРАБАТЫВАЕТСЯ НА ПК almaBTE И ПОКАЗЫВАЕТ ХОРОШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ В СОПОСТАВЛЕНИИ С ДАННЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТА	ДЛЯ РАСЧЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПО СЛОЯМ ИСПОЛЬЗОВАЛСЯ ГИБРИДНЫЙ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ НЕЙРОСЕТЕВОЙ АЛГОРИТМ, ПРИМЕНЕНИЕ КОТОРОГО ПОКАЗАЛО ХОРОШУЮ СХОДИМОСТЬ ДАННЫХ РАСЧЕТОВ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ
Недостатки	НЕ РАСММАТРИВАЕТСЯ ГРАНИЧНОЕ ТЕРМОСОПРОТИВЛЕНИЕ ВВИДУ СЛОЖНОСТИ ФОРМУЛЫ МОДЕЛИ ТРУДНО ПОДОБРАТЬ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ЕЕ РЕШЕНИЯ	ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ ТОЧНОСТИ НЕОБХОДИМО НАЛИЧИЕ ПРОФИЛЯ ПОСЛОЙНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕЩЕСТВ	БЫЛ РАССМОТРЕН СЛУЧАЙ С ОДИНАКОВЫМ РАЗМЕРОМ СЛОЕВ И ОДИНАКОВЫМ РАСПРЕДАЛЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ ВНУТРИ СЛОЯ.



## ► ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС almaBTE



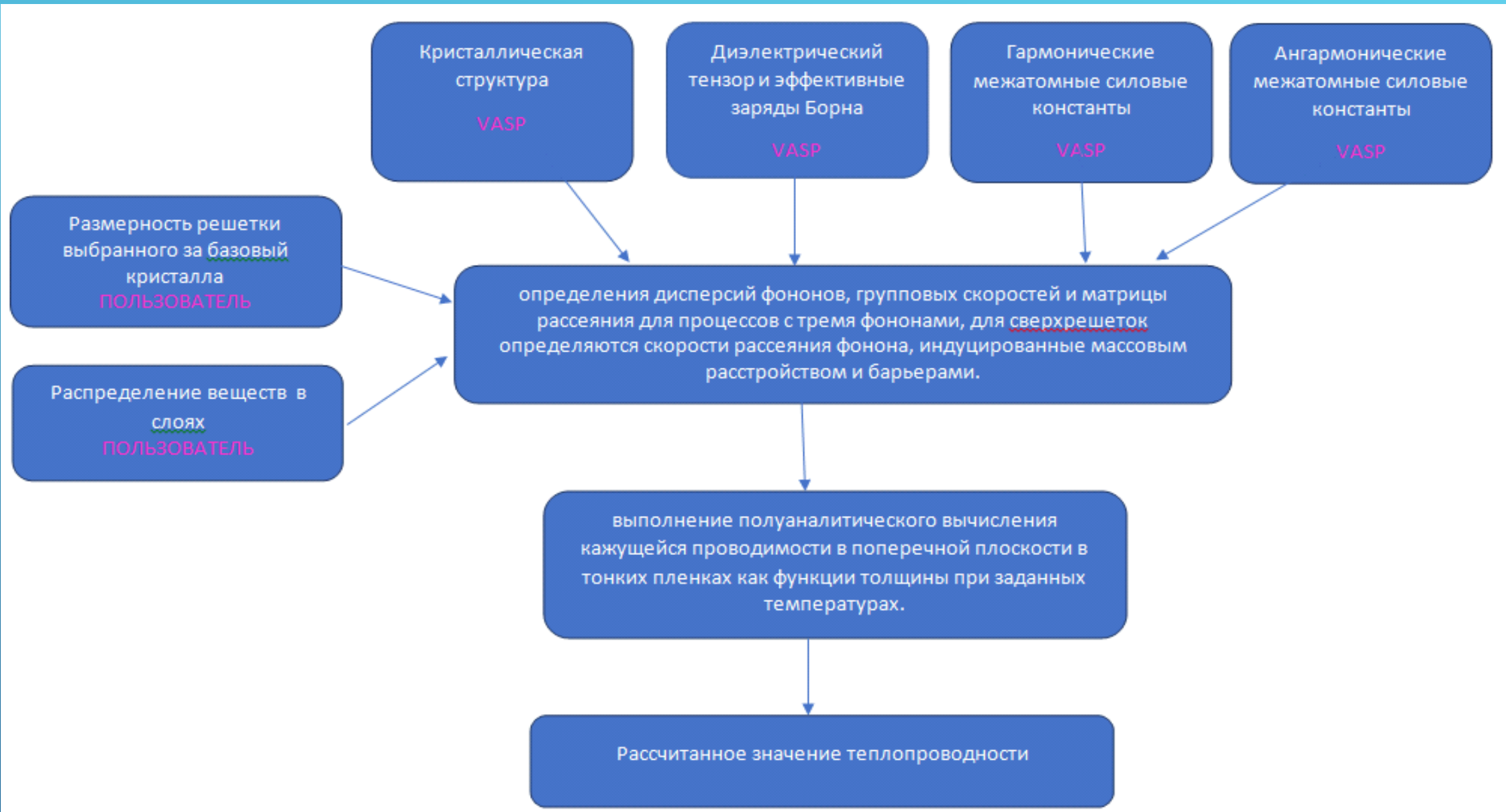
ALMAMABTE - ЭТО ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ, КОТОРЫЙ РЕШАЕТ ЗАВИСЯЩЕЕ ОТ ПРОСТРАНСТВА И ВРЕМЕНИ ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ ФОНОНОВ, ИСПОЛЬЗУЯ В КАЧЕСТВЕ ВХОДНЫХ ДАННЫХ ТОЛЬКО ВЫЧИСЛЕННЫЕ ВЕЛИЧИНЫ АВ-INITIO.

AB INITIO (ЛАТ. ОТ НАЧАЛА) В ФИЗИКЕ — РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ИЗ ПЕРВЫХ ОСНОВОПОЛАГАЮЩИХ ПРИНЦИПОВ БЕЗ ПРИВЛЕЧЕНИЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ЭМПИРИЧЕСКИХ ПРЕДПОЛОЖЕНИЙ. ОБЫЧНО ПОДРАЗУМЕВАЕТСЯ ПРЯМОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

ПРОГРАММА МОЖЕТ ПРОГНОЗИРОВАТЬ ПЕРЕНОС ФОНОНОВ В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ И СПЛАВАХ, ТОНКИХ ПЛЕНКАХ, СУПЕРСЛОЯХ И МНОГОЯРУСНЫХ СТРУКТУРАХ С РАЗМЕРАМИ В ДИАПАЗОНЕ НМ-МКМ. СРЕДИ МНОГИХ ДРУГИХ ВЕЛИЧИН, ПРОГРАММА МОЖЕТ ВЫДАВАТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ЭФФЕКТИВНЫЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ, ПРОСТРАНСТВЕННО-РАЗРЕШЕННЫЕ СРЕДНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПРОФИЛИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ ТОКОВ, РАЗРЕШЕННЫЕ ПО ЧАСТОТЕ И ПРОСТРАНСТВУ. ЕГО ПЕРВООСНОВНОЙ ХАРАКТЕР ДЕЛАЕТ ALMABTE ОСОБЕННО ПОДХОДЯЩИМ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР.

# ► АЛГОРИТМ РАСЧЕТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПК almaBTE

15



Были рассмотрены различные математические модели и алгоритмы, применяемые для изучения теплопереноса в арсенид галлиевых наноструктурах.

Принципиальным по мнению автора работы является необходимость учитывать рассеяние фононов как внутри слоев гетероструктуры так и на границе (интерфейсе), в алгоритмической зависимости от вариантов поведения термического сопротивления сверхрешетки:

- Возможна интерференция волн, отраженных от разных интерфейсов, которая приводит к разрывам частотных распределений фононов. Такое положение наблюдается в случае, если средняя длина свободного пробега превышает период более чем в 10 раз;
- Если средняя длина свободного пробега не достаточна для разрыва частот, то решающим влиянием на термическое сопротивление решетки будет оказывать единичный интерфейс.
- Для термического сопротивления многослойной системы безусловное влияние оказывает период решетки и зависимость теплопроводности от материалов. Увеличение периода решетки до определенных границ (пока толщина слоя не превысит порогового значения) приводит к увеличению теплопроводности. Однако в случае, если период решетки становится больше критической толщины, которая равна длине свободного пробега фононов, рост теплопроводности больше не наблюдается.

Именно сочетание всех указанных факторов для внесения в модель теплопереноса, позволит создать модель, способную дать вычисленные данные максимально приближенные к данным, полученным экспериментальным путем.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Осуществлен обзор подходов к моделям теплопереноса в многослойных структурах.
- Изучены различные математические модели и алгоритмы, применяемые для изучения теплопереноса в арсенид галлиевых наноструктурах.
- Проанализированы достоинства и недостатки рассмотренных моделей и предложены подходы к решению поставленной задачи



**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!**

Several white lines of varying lengths and slopes are positioned in the bottom right corner of the slide, creating a modern, abstract graphic element.