ЖЭТФ, 2015, том 147, вып. 4, стр. 736–749

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРЕМНИЕВЫХ НАНОПЛЕНОК

И. И. Кулеев*[*], *С. М. Бахарев*, *И. Г. Кулеев*, *В. В. Устинов

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 2 сентября 2014 г.

Исследовано влияние фокусировки фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок в трехмодовой модели Каллавея. Определены ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем как при низких, так и при комнатных температурах. Показано, что при диффузном отражении фононов от границ наименьшей рассеивающей способностью (и максимальной теплопроводностью) обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$, а максимальной рассеивающей способностью (и минимальной теплопроводностью) — плоскость с ориентацией $\{111\}$. В достаточно широких пленках величины теплопроводности в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки, тогда как для нанопроводов с квадратным сечением они зависят, главным образом, от направления теплового потока. Проанализировано влияние анизотропии упругой энергии на зависимости теплопроводности от геометрических параметров пленок. Определены температуры перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации.

DOI: 10.7868/S0044451015040084

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с развитием технологии и широким использованием нанопленок и нанопроводов в микроэлектронике значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств [1–6]. Длины свободного пробега фононов для наноструктур в широком температурном интервале оказываются больше или сравнимы с их характерными размерами. Поэтому рассеяние фононов на границах играет важную роль в их теплосопротивлении в интервале температур от гелиевых до комнатных [7]. В работе [7] исследовано влияние фокусировки тепловых фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым сечением в трехмодовой модели Каллавея. Показано, что температурные зависимости теплопроводности нанопроводов с диаметрами более 50 нм могут быть описаны в рамках стандартного релаксационного метода. Использование вычисленных нами времен релаксации фононов на границах [8, 9] в рамках метода Казимира–МакКарди [10, 11], а также параметров ангармонического рассеяния, найденных для объемных кристаллов Si [12], позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности нанопроводов [4] в интервале температур от 20 до 300 К. Показано, что при комнатной температуре вклад граничного рассеяния в теплосопротивление нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм составляет соответственно 40 и 60 % [7]. Ранее для этих параметров и времен релаксации фононов [8, 9] нам удалось согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности объемных кристаллов Si [12] с экспериментальными данными [11] для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образцов.

В настоящей работе воспользуемся результатами работ [7–9, 12] и проанализируем температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок в температурном интервале от 17 до 350 К. Рассмотрим особенности фононного транспорта, обусловленные анизотропией упругой энергии. Извест-

[*]E-mail: kuleev@imp.uran.ru

но [13–15], что анизотропия упругой энергии кубических кристаллов приводит к неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононов и их фокусировке. Экспериментальные исследования [11] показали, что при достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца, фокусировка фононов приводит к зависимости теплопроводности объемных кристаллов Si и CaF_2 от направления теплового потока и ориентации боковых граней образца. Поэтому, как показано в работе [12], для корректного учета фокусировки фононов при описании анизотропии теплопроводности $\kappa(T)$ и длин свободного пробега Λ в монокристаллических наноструктурах следует ввести два ориентационных параметра. Они учитывают зависимости кинетических характеристик фононной системы от ориентации боковых граней образца и направления $[I(\psi)]$ теплового потока, где угол ψ определяет его направление относительно осей кристалла в плоскости $\{J\}$. Для пленок в качестве $\{J\}$ выбирается ориентация плоскости пленки, для объемных материалов [12] с прямоугольным сечением — ориентация широкой грани образца. Поэтому, в отличие от изотропной среды, кинетические характеристики монокристаллических наноструктур зависят от двух ориентационных параметров:

$$\kappa(T) \Rightarrow \kappa^{\{J\}}_{[I(\psi)]}(T) \quad \text{и} \quad \Lambda \Rightarrow \Lambda^{\{J\}}_{[I(\psi)]}.$$

Предложенный метод является актуальным, поскольку в значительном числе публикаций, посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах, эффекты, обусловленные фокусировкой фононов, не учитывались. Так, например, в работах [16, 17] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась теория Казимира [11], справедливая только для модели изотропной среды. А при изложении экспериментальных результатов в обзорах [1–3] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Нами показано, что изменение ориентации кремниевой пленки может приводить к изменению значений теплопроводности более, чем в два раза. Далее будет видно, что отсутствие такой информации создает определенные трудности при интерпретации результатов эксперимента.

В работах [5, 6] были измерены температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок различной толщины в интервале температур от 17 до 350 К. В низкотемпературной области 20–40 К теплопроводность пленок толщиной $D = 1.6$, 0.83, 0.42 мкм в пределах погрешности эксперимента следовала зависимости $\kappa(T) \propto T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при расчете теплопроводности пленок, как и при анализе теплопроводности нанопроводов [7], будет использован трехмерный спектр акустических фононов. Мы проанализируем влияние фокусировки фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок, экспериментально исследованных в работах [5, 6]. Покажем, что использование времен релаксации фононов для рассеяния на границах образцов с учетом фокусировки фононов [8, 9], а также параметров ангармонического рассеяния [7, 12] позволяет удовлетворительно описать температурные зависимости теплопроводности пленок во всем температурном интервале. Рассмотрим зависимости теплопроводности от геометрических параметров, ориентаций плоскостей пленок и направлений теплового потока относительно осей кристалла. Решение этих проблем позволит определить ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем. Эти проблемы являются актуальными для кремниевой микроэлектроники [1–6] и являются предметом изучения настоящей работы.

2. МЕХАНИЗМЫ РЕЛАКСАЦИИ ФОНОНОВ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОПЛЕНОК

Для анализа теплопроводности используется трехмодовая модель Каллавея [18–20]. В этой модели выделяются вклады резистивных $\nu^{\lambda\{J\}}_{R[I(\psi)]}(q)$ и нормальных $\nu^{\lambda}_{N}(q)$ процессов релаксации фононов в полную скорость релаксации $\nu^{\lambda\{J\}}_{[I(\psi)]}(q)$, где $\mathbf{q}$ — волновой вектор фонона. Резистивные процессы рассеяния приводят к релаксации импульса фононной системы. К ним относятся рассеяние фононов на фононах в процессах переброса, $\nu^{\lambda}_{U}(q)$, на дефектах $\nu^{\lambda}_{iso}(q)$ и на границах образца, $\nu^{\lambda\{J\}}_{B[I(\psi)]}$, поэтому

$$\nu^{\lambda\{J\}}_{R[I(\psi)]} = \nu^{\lambda\{J\}}_{B[I(\psi)]} + \nu^{\lambda}_{iso}(q) + \nu^{\lambda}_{U}(q).$$

В нормальных процессах релаксации импульс фононной системы сохраняется. Эти процессы перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение, которое описывается смещенной функцией Планка [7, 18–20]. Если в этих процессах участвуют фононы различных поляризаций, то они стремятся установить одинаковую скорость дрейфа для всех ветвей фононного спектра. Мы рассматриваем этот вариант релаксации импульса в нормальных процессах рассеяния для кремниевых пленок аналогично тому, как это сделано ранее [7] для нанопроводов. В отличие работ [18–23] при анализе фононного транспорта мы учитываем фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности от ориентации теплового потока.

Решеточную теплопроводность в трехмодовой модели Каллавея можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного $\kappa^{\{J\}}_{dif[I(\psi)]}$ и дрейфового $\kappa^{\{J\}}_{dr[I(\psi)]}$ вкладов. В отличие от нанопроводов с круглым сечением, теплопроводность пленок зависит не только от направления $[I(\psi)]$ потока тепла, но и от ориентации $\{J\}$ плоскости пленки:

$$\kappa^{\{J\}}_{dif[I(\psi)]}(T) = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_\lambda \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi\, y^3 \times \\ \times \int_0^1 \frac{(V^\lambda_{g3})^2 z_\lambda^2 x^2}{\nu^{\lambda\{J\}}_{[I(\psi)]} \operatorname{sh}^2(z_\lambda/2)}\, dx, \tag{1}$$

$$\kappa^{\{J\}}_{dr[I(\psi)]}(T) = \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \times \\ \times \sum_\lambda B^{\{J\}}_{[I(\psi)]}(T) \Psi^{\lambda\{J\}}_{N[I(\psi)]}(T),$$

где

$$B^{\{J\}}_{[I(\psi)]}(T) = \sum_\lambda \Psi^{\lambda\{J\}}_{N[I(\psi)]} \Big/ \sum_\lambda \Psi^{\lambda\{J\}}_{NR[I(\psi)]},$$

$$\Psi^{\lambda\{J\}}_{N[I(\psi)]} = 3\int_{-1}^{1} \cos\theta\, d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi\, y^4 \times \\ \times \int_0^1 \frac{V^\lambda_{gz} x^3 z_\lambda}{\operatorname{sh}^2 z_\lambda/2} \frac{\nu^\lambda_N}{\nu^{\lambda\{J\}}_{[I(\psi)]}}\, dx,$$

$$\Psi^{\lambda\{J\}}_{NR[I(\psi)]} = \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi\, y^5 \times \\ \times \int_0^1 \frac{x^4}{\operatorname{sh}^2 z_\lambda/2} \frac{\nu^\lambda_N \nu^{\lambda\{J\}}_{R[I(\psi)]}}{\nu^{\lambda\{J\}}_{[I(\psi)]}}\, dx, \tag{2}$$

$$z_\lambda = \frac{\hbar\omega^\lambda_q}{k_B T}, \quad x = \frac{q}{q_{max}(\theta,\varphi)},$$

$$y(T,\theta,\varphi) = \frac{q_{max}(\theta,\varphi)}{q_T}, \quad q_T = \frac{k_B T}{\hbar},$$

$q_{max}(\theta,\varphi)$ — максимальный волновой вектор [24], углы θ,φ определяют направление волнового вектора фонона, V^λ_{g3} и V^λ_{gz} — проекции групповой скорости соответственно на направление градиента температуры и на ось z, ω^λ_q — частота фонона с поляризацией λ при учете дисперсии тепловых фононов. Индексы «λ» поляризации фононов выберем следующим образом: индекс «l» соответствует продольным фононам, а «t_1» и «t_2» — соответственно «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам.

При расчете теплопроводности пленок, как и для нанопроводов [7], используется трехмерный спектр тепловых фононов в Si, определенный из данных по неупругому рассеянию нейтронов [24]. Для симметричных направлений он аппроксимируется полиномом седьмой степени по приведенному волновому вектору x фонона, а при экстраполяции спектра на всю зону Бриллюэна используется разложение по кубическим гармоникам (см. подробнее [25]). Эта аппроксимация сохраняет кубическую симметрию и позволяет анализировать изменение фокусировки фононов при переходе от длинноволнового предела $x \ll 1$ к коротковолновому пределу $x \sim 1$. В пределе длинных волн $x \ll 1$ она переходит в модель анизотропного континуума.

Важной характеристикой, определяющей фононный транспорт, является групповая скорость. В системе координат, связанной с ребрами куба, она может быть представлена в виде [25]

$$\mathbf{V}^\lambda_g(x,\theta,\varphi) = \frac{d\omega^\lambda_q}{d\mathbf{q}} = V^\lambda_n(x,\theta,\varphi)\mathbf{n} + \\ + S^\lambda_\theta(x,\theta,\varphi)\mathbf{e}_\theta + S^\lambda_\varphi(x,\theta,\varphi)\mathbf{e}_\varphi, \tag{3}$$

где компоненты $V^\lambda_n(x,\theta,\varphi)$, $S^\lambda_\theta(x,\theta,\varphi)$ и $S^\lambda_\varphi(x,\theta,\varphi)$ определяются следующими производными (см. подробнее [25]):

$$V^\lambda_n(x,\theta,\varphi) = \frac{\partial\omega^\lambda_q}{\partial q}, \quad S^\lambda_\theta(x,\theta,\varphi) = \frac{1}{q}\frac{\partial\omega^\lambda_q}{\partial\theta},$$

$$S^\lambda_\varphi(x,\theta,\varphi) = \frac{1}{q\sin\theta}\frac{\partial\omega^\lambda_q}{\partial\varphi},$$

$\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ — единичный волновой вектор фонона, $\mathbf{e}_\theta = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)$. Векторы $\mathbf{n}$, $\mathbf{e}_\theta$ и $\mathbf{e}_\varphi$ образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов. Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость зависит не только от углов θ и φ, но и от приведенного волнового вектора фонона x, т. е. $\mathbf{V}^\lambda_g = \mathbf{V}^\lambda_g(x,\theta,\varphi)$. Компоненты групповой скорости фононов, необходимые для расчета температурных зависимостей теплопроводности, в декартовой системе координат имеют вид

$$
\begin{aligned}
V_{gx}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) &= V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi + \\
&+ S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta\cos\varphi - S_{\varphi}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\varphi, \\
V_{gy}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) &= V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta\sin\varphi + \\
&+ S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta\sin\varphi + S_{\varphi}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\varphi, \\
V_{gz}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) &= V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta - S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Рассмотрим фононный транспорт в пленках длины L, имеющих прямоугольное сечение со сторонами D (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Проанализируем зависимости теплопроводности от геометрических и ориентационных параметров, когда тепловой поток вращается в плоскости пленки для трех случаев: 1) плоскость пленки совпадает с плоскостью грани куба yz, $\{J\} = \{100\}$; 2) плоскость пленки совпадает с диагональной плоскостью, $\{J\} = \{110\}$; 3) плоскость пленки перпендикулярна диагонали куба, $\{J\} = \{111\}$. Ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные тепловому потоку. Определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки, она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно двум узким боковым граням пленки. Тогда компоненты групповой скорости фононов для случая 1 могут быть представлены в виде

$$
\begin{aligned}
&V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda}\sin\psi + V_{gz}^{\lambda}\cos\psi, \\
&V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda}\cos\psi + V_{gz}^{\lambda}\sin\psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda},
\end{aligned}
\tag{5}
$$

для случая 2 —

$$
\begin{aligned}
V_{g3}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda})\sin\psi + V_{gz}^{\lambda}\cos\psi, \\
V_{g2}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda})\cos\psi - V_{gz}^{\lambda}\sin\psi, \\
V_{g1}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}),
\end{aligned}
\tag{6}
$$

для случая 3 —

$$
\begin{aligned}
V_{g3}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda})\sin\psi + \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}}\left[-\frac{1}{2}(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) + V_{gz}^{\lambda}\right]\cos\psi, \\
V_{g2}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda})\cos\psi + \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}}\left[-\frac{1}{2}(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) + V_{gz}^{\lambda}\right]\sin\psi, \\
V_{g1}^{\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda}).
\end{aligned}
\tag{7}
$$

Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^{λ}. Проекция групповой скорости V_{g1}^{λ} не зависит от угла ψ, поскольку ось «1» является осью вращения (см. формулы (5)–(7)).

Влияние фокусировки на теплопроводность пленок определяется граничным рассеянием фононов. В работах [8, 9] дано полное аналитическое решение задачи диффузного рассеяния фононов на границах для образцов конечной длины, сформулированной в работе [11]. Это позволило определить скорости релаксации фононов на границах для образцов с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Для пленок они определяются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами $k_0 = L/2D$ и $\mu = W/D$. При выполнении неравенств $\mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| \ge k_0$ или $\mu|V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| \ge k_0/\mu$ выражения для скоростей релаксации фононов на границах имеют вид [9]

$$
\begin{aligned}
&\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi) = \frac{|V_{g3}^{\lambda}|}{k_0 D} \times \\
&\times \left\{1 - \frac{k_0}{2}\,\frac{|V_{g2}^{\lambda}| + \mu|V_{g1}^{\lambda}|}{\mu|V_{g3}^{\lambda}|} + \frac{k_0^2}{3}\,\frac{|V_{g1}^{\lambda}||V_{g2}^{\lambda}|}{\mu(V_{g3}^{\lambda})^2}\right\}^{-1}.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Если $\mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| < k_0$ или $\mu|V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| < k_0/\mu$, то скорости релаксации определяются выражениями для образцов бесконечной длины:

$$
\begin{aligned}
&\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta,\varphi) = \\
&= \begin{cases}
\dfrac{6}{D}\,\dfrac{\mu(V_{g1}^{\lambda})^2}{3\mu|V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}|}, & \mu|V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|, \\[2ex]
\dfrac{6}{\mu D}\,\dfrac{(V_{g2}^{\lambda})^2}{3|V_{g2}^{\lambda}| - \mu|V_{g1}^{\lambda}|}, & |V_{g2}^{\lambda}| > \mu|V_{g1}^{\lambda}|.
\end{cases}
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Таблица 1. Параметры, определяющие релаксацию фононов в кремниевых нанопленках

A_N^l, К$^{-5}\cdot$с$^{-1}$	A_N^t, К$^{-5}\cdot$с$^{-1}$	A_U^l, К$^{-3}\cdot$с$^{-1}$	A_U^{t1}, К$^{-3}\cdot$с$^{-1}$	A_U^{t2}, К$^{-3}\cdot$с$^{-1}$	C_U^l, К	C_U^t, К
0.8	$2.0\cdot 10^{-3}$	$2.0\cdot 10^{3}$	$1.80\cdot 10^{3}$	$0.70\cdot 10^{3}$	310	98

Случай $\mu = 1$ соответствует нанопроводу с квадратным поперечным сечением. Зависимости теплопроводности от направления $[I(\psi)]$ градиента температуры и ориентации $\{J\}$ плоскости пленки относительно осей кристалла определяются величинами компонент групповой скорости фононов V_{g3}^λ и V_{g1}^λ, V_{g2}^λ, которые входят непосредственно в теплопроводность и в скорости релаксации $\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$.

Скорости релаксации фононов на изотопическом беспорядке в кубических кристаллах, согласно работе [26], имеют вид

$$\nu_{iso}(\omega_q^\lambda) = \frac{\pi}{6}\, gV_0(\omega_q^\lambda)^2 D(\omega_q^\lambda). \qquad (10)$$

Здесь V_0 — объем, приходящийся на один атом, g — фактор изотопического беспорядка, $g = \sum_i C_i(\Delta M_i/\overline{M})^2$, где $\Delta M = M_i - \overline{M}$, M_i — масса i-го изотопа, $\overline{M} = \sum_i C_i M_i$ — средняя масса изотопной композиции, а C_i — концентрация i-го изотопа ($g = 2.01\cdot 10^{-4}$ для Si^{nat}), $D(\omega)$ — плотность фононных состояний. В модели анизотропного континуума выражение (10) для Si можно представить в виде [27]

$$\nu_{iso}^\lambda \approx A_{iso}(Tz_\lambda)^4, \quad A_{iso} = \frac{gV_0}{12\pi}\left(\frac{k_B}{\hbar}\right)^4 \Phi, \quad \Phi \approx 1.45\cdot 10^{-18}\ \left(\frac{\text{с}}{\text{см}}\right)^3. \qquad (11)$$

Для скорости релаксации фононов в трехфононных процессах переброса используется выражение [20–23, 28]

$$\nu_U^\lambda = A_U^\lambda z_\lambda^2 T^3 \exp\left[-(C_U^\lambda/T)\right]. \qquad (12)$$

Для кристаллов Si параметры A_U^λ, C_U^λ приведены в табл. 1 (см. также [20–23]). Для продольных фононов основным механизмом N-процессов является механизм Херринга [29], а для поперечных фононов — механизм Ландау – Румера [30]

$$\nu_N^l = A_{LTT}^N T^5 z_l^2, \quad \nu_N^t = A_{TLL}^N T^5 z_t. \qquad (13)$$

Для подгоночных параметров, приведенных в табл. 1, частота релаксации поперечных фононов в N-процессах на три порядка меньше, чем продольных. Нетрудно убедиться, что во всей температурной области для поперечных фононов выполняется неравенство $\nu_N^t(q) \ll \nu_R^t(q)$, и их вклад в теплопроводность определяется диффузионным движением. Для продольных фононов $\nu_N^l/\nu_R^l < 1$ в интервале температур 20 К $< T <$ 100 К, однако при более высоких температурах это отношение оказывается значительно больше единицы. Поэтому для них мы учитываем дрейфовый вклад в теплопроводность в трехмодовой модели Каллавея.

3. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРЕМНИЕВЫХ ПЛЕНОК

Проанализируем температурные зависимости теплопроводности пленок и сравним с результатами экспериментальных исследований [5, 6]. Отметим, что перед измерением теплопроводности поверхность образцов кремния обрабатывалась наждаком, для того чтобы обеспечить диффузное рассеяние фононов границами [11]. Диффузный характер рассеяния фононов реализуется, если геометрические параметры шероховатостей на границе образца будут больше длины волны фонона или сравнимы с ней [23, 31, 32]. Для наноструктур такая процедура невозможна. Поэтому для них необходимо учитывать частичную зеркальность отражения фононов. Ее учет проводится обычным образом [22, 23, 31, 32]:

$$\tilde{\nu}_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(P,x,\theta,\varphi) = \frac{1-P}{1+P}\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi), \qquad (14)$$

где P — фактор зеркальности. Для кремниевых нанопроводов с круглым сечением в работе [7] показано, что при учете фактора зеркальности $P = 0.15$ результаты расчета теплопроводности нанопроводов хорошо согласуются с экспериментальными данными [4] во всей температурной области. К сожалению, для пленок при изложении экспериментальных результатов в работах [5, 6] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Обычно в технологии «SOI» пленки кремния выращивают с ориентациями $\{100\}$ или $\{111\}$ [33]. Нами показано, что для этих ориентаций в достаточно

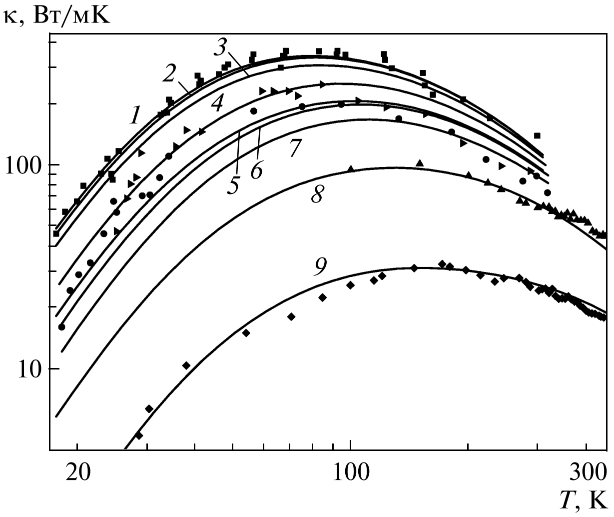

Рис. 1. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок для различных толщин D, параметров зеркальности P и длин пленок L: кривые *1–3* — $D = 1.6$ мкм, $P = 0.48$, $L = 8$ мкм; кривая *4* — $D = 0.83$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривые *5–7* — $D = 0.42$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривая *8* — $D = 0.10$ мкм, $P = 0.14$, $L = 100D$; кривая *9* — $D = 0.02$ мкм, $P = 0$, $L = 100D$. Ориентации плоскости пленки: {100} — кривые *1, 4, 5, 8, 9*; {110} — кривые *2, 6*; {111} — кривые *3, 7*. Символы — экспериментальные данные [5, 6] для $D = 1.6$ мкм (■), 0.83 мкм (▶), 0.42 мкм (●), 0.10 мкм (▲), 0.02 мкм (⧫)

широких пленках ($L \gg D$ и $W \gg D$) теплопроводность в плоскости пленки практически не зависит от направления потока тепла (см. разд. 5). Однако ее зависимость от ориентации плоскости пленки является существенной: при переходе от ориентации {100} к {111} теплопроводность может увеличиваться более чем в два раза.

Поскольку информация об ориентации плоскостей пленок в работах [5, 6] отсутствует, мы рассчитали температурные зависимости теплопроводности для трех ориентаций $\{J\} = \{100\}, \{110\}, \{111\}$ и согласовали результаты расчета с экспериментальными данными, воспользовавшись параметром P в качестве подгоночного. Результаты такой подгонки для пленок различной толщины приведены на рис. 1. В пленках с $D = 1.6$ мкм и ориентацией {100} значения теплопроводности хорошо согласуются с данными эксперимента [5] при $P_{\{100\}} = 0.48$. Отметим, что при $P = 0.48$ и $T = 20$ К для ориентаций {110} и {111} они оказываются соответственно на 7 % и 21 % меньше, чем для ориентации {100}, а отношения значений теплопроводности для них составляет

$$\kappa^{\{100\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{110\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{111\}}_{[I(\psi)]} = 1.21 : 1.13 : 1.$$

При значениях параметров $P_{\{110\}} = 0.51$ и $P_{\{111\}} = 0.56$ величины теплопроводности $\kappa^{\{110\}}_{[I(\psi)]}(T)$ и $\kappa^{\{111\}}_{[I(\psi)]}(T)$ также хорошо согласуются с экспериментальными данными и близки к значениям $\kappa^{\{100\}}_{[I(\psi)]}(T)$ при $P_{\{100\}} = 0.48$. Для пленок с $D = 0.83$ мкм и $D = 0.42$ мкм с ориентацией {100} результаты расчета согласуются с экспериментальными данными при $P_{\{100\}} = 0.29$. Однако для ориентаций {110} и {111} в этих пленках экспериментальные данные согласуются с результатами расчета при $P_{\{110\}} = 0.37$ и $P_{\{111\}} = 0.5$ (см. рис. 1). Отношения значения теплопроводности для пленок с $D = 0.42$ мкм при $P_{\{100\}} = 0.29$ и $T = 20$ К с различной ориентацией плоскости пленки составляют

$$\kappa^{\{100\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{110\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{111\}}_{[I(\psi)]} = 1.62 : 1.36 : 1.$$

Как видно из рис. 1, результаты расчета теплопроводностей для ультратонких пленок с $D = 100$ нм и $D = 20$ нм и ориентацией плоскости {100} также удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [6]. Уменьшение толщины пленки приводит к возрастанию роли граничного рассеяния и, соответственно, к увеличению анизотропии теплопроводности. Отношения значений теплопроводности в пленках с $D = 100$ нм при $P_{\{100\}} = 0.14$ и $T = 20$ К для различных ориентаций плоскости пленки составляют

$$\kappa^{\{100\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{110\}}_{[I(\psi)]} : \kappa^{\{111\}}_{[I(\psi)]} = 2.17 : 1.53 : 1.$$

Для пленки с $D = 20$ нм параметр зеркальности P, по-видимому, близок к нулю — температурная зависимость теплопроводности для нее удовлетворительно описывается для значения $P = 0$.

Итак, при диффузном рассеянии фононов на границах кремниевых пленок наименьшей рассеивающей способностью (и максимальной теплопроводностью) обладает плоскость с ориентацией {100}, а максимальной рассеивающей способностью (и минимальной теплопроводностью) — плоскость с ориентацией {111}.

Следует отметить, что в значительном числе публикаций (см., например, работы [5, 6, 17, 34, 35]) граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках ($D \ll L$ и $D \ll W$) учитывалось аналогично тому, как это было сделано в работах [36, 37] при анализе проводимости тонких металлических пленок.

При этом предполагалось, что длины свободного пробега и времена релаксации фононов в пленках зависят только от ее толщины [5, 6, 17, 34, 35]. В модели изотропной среды граничное рассеяние не приводило к анизотропии теплопроводности [5, 6, 17]. Непосредственное обобщение результатов работ [36, 37] на упруго-анизотропные кристаллы дает выражение для скорости релаксации на границах, которое зависит только от толщины D и компоненты групповой скорости V_{g1}^{λ}, перпендикулярной плоскости пленки [34]:

$$\nu_B^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{1-P}{1+P}\,\frac{V_{g1}^{\lambda}}{D}. \qquad (15)$$

Способ определения фактора зеркальности P и его связь с шероховатостью поверхности не меняют суть проблемы [31, 32, 34–38]. Учет граничного рассеяния в виде (15) приводит к некорректным результатам для зависимости теплопроводности от геометрических параметров и ориентаций плоскостей пленок. Согласно работам [16, 39, 40], теплопроводность пленок и длины пробега фононов существенно зависит от геометрических размеров. Более того, показано [16, 39], что длины Казимира в модели изотропной среды не только существенно зависят от ширины пленки, но и логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Как отмечалось [16, 39], эта расходимость обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. В работе [40] рассмотрено влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов в режиме граничного рассеяния от геометрических параметров пленок и направлений теплового потока. Показано, что длины Казимира в монокристаллических пленках также логарифмически расходятся, когда ширина пленки стремится к бесконечности. Однако их значения для фононов различных поляризаций в отличие от изотропной среды значительно различаются. Учет конечной длины приводит к устранению этой расходимости [40]. Более подробно особенности фононного транспорта в режиме граничного рассеяния в монокристаллических пленках кубической симметрии с различным типом анизотропии упругой энергии проанализированы в работе [40].

Не является удивительным, что результаты, полученные в [34], для анизотропии теплопроводности также являются некорректными. Расчет температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок в работе [34] с использованием выражения (15) показал, что ее максимальные значения достигаются для ориентации {110}, а минимальные — для ориентации {100} (см. [34], рис. 4*a*). Авторы делают вывод, что при диффузном рассеянии фононов на границах пленок наименьшей рассеивающей способностью обладает плоскость с ориентацией {110}, а максимальной — с ориентацией {100}. Эти результаты являются ошибочными. Они противоречат экспериментальным данным [11] и результатам работ [12, 40]. В [11] показано, что в двух одинаковых образцах Si с прямоугольным сечением и градиентом температуры в направлении [110] теплопроводность для образца с широкой гранью {100} оказалась на 33 % выше, чем для образца с широкой гранью {110}. Этот результат диаметрально противоположен выводу, полученному в [34]. Следует отметить, что расчеты теплопроводности объемных образцов Si с использованием выражений (8) и (9) хорошо согласуются с экспериментальными данными [11]. Они количественно описывают зависимости теплопроводности Si как от направления теплового потока, так и от ориентации боковых граней образцов [12].

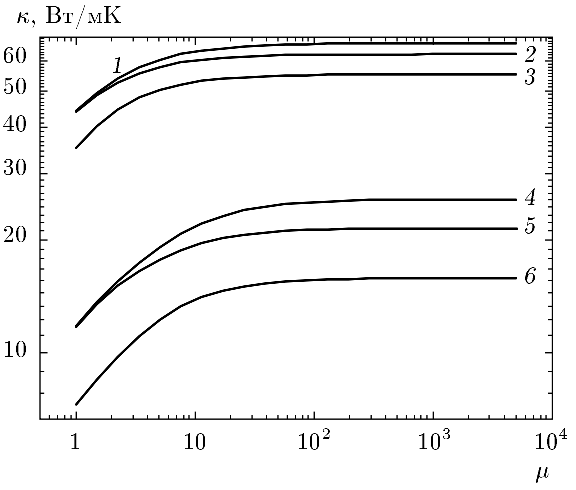

Рис. 2. Зависимости теплопроводности кремниевых пленок от параметра μ при $T = 20$ К, $L = 8$ мкм, толщинах пленки $D = 1.6$ мкм (*1–3*), 0.42 мкм (*4–6*) и ориентациях плоскости пленки $\{J\} = \{100\}$ (*1, 4*), {110} (*2, 5*), {111} (*3, 6*)

Итак, при диффузном рассеянии на границах пленок Si наименьшей рассеивающей способностью обладает плоскость с ориентацией {100}, а максимальной — плоскость с ориентацией {111} (см. также [12]). Мы привели подробное обсуждение ориентационной зависимости теплопроводности, поскольку эта проблема играет важную роль в кремниевой микроэлектронике.

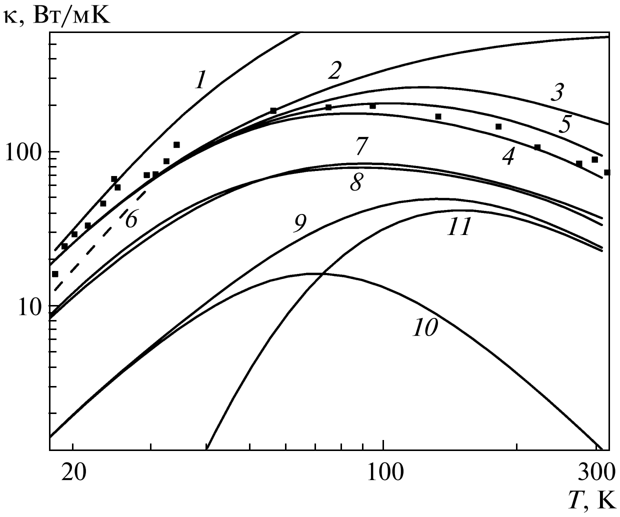

Рис. 3. Температурные зависимости теплопроводности кремниевой пленки с $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм и $P = 0.29$ для направления градиента температуры [100] и ориентации пленки $\{100\}$ при включении различных механизмов рассеяния фононов: кривая *1* — режим граничного рассеяния $\nu = \tilde{\nu}_{B[100]}^{\lambda\{100\}}$; кривая *2* — $\nu = \tilde{\nu}_{B[100]}^{\lambda\{100\}} + \nu_{iso}$; кривая *3* — $\nu = \tilde{\nu}_{B[100]}^{\lambda\{100\}} + \nu_{iso} + \nu_U$; кривая *4* — вклад диффузионного движения; кривая *5* — полная теплопроводность; кривая *6* — режим граничного рассеяния при $P = 0$; кривая *7* — вклад быстрой поперечной моды; кривая *8* — вклад медленной поперечной моды; кривая *9* — суммарный вклад продольных фононов; кривая *10* — диффузионный вклад продольной моды; кривая *11* — вклад дрейфового движения продольных фононов. Символы — экспериментальные данные [5]

Анализ зависимости теплопроводности пленок от геометрических параметров показал, что при фиксированных величинах D и L увеличение ширины пленки приводит к возрастанию теплопроводности (рис. 2). При этом область ее интенсивного роста ограничена значениями $\mu < 2L/D$, или $W < 2L$. При $\mu > 20L/D$ зависимости теплопроводности выходят на насыщение (см. рис. 2). При $\mu_n = 20L/D$ (например, для $D = 1.6$ мкм величина $\mu_n = 10^2$) теплопроводность всего лишь на 0.5 % меньше предельного значения. Что касается зависимости теплопроводности от длины пленки при фиксированных величинах D и W, область ее интенсивного роста ограничена значениями $L < \mu D$. При длинах $L > 20\mu D$ она выходит на насыщение.

Для иллюстрации влияния различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок в различных температурных интервалах на рис. 3 приведены результаты расчета для пленки с $D = 0.42$ мкм. В низкотемпературной области основными механизмами релаксации фононов для пленок с $D = 1.6$, 0.42 мкм являются граничное и изотопическое рассеяния. В интервале температур от 17 до 40 К учет этих механизмов позволяет согласовать результаты расчета с экспериментальными данными [5]. Вклады изотопического рассеяния при $T = 20$ К составляют 33 % и 21 % соответственно для пленок с $D = 1.6$ мкм и $D = 0.42$ мкм. Отметим, что при диффузном рассеянии фононов на границах теоретические кривые для ориентации плоскостей пленок $\{100\}$ идут на 57 % и 36 % ниже экспериментальных данных соответственно для $D = 1.6$ мкм и $D = 0.42$ мкм (рис. 3, кривая *6*). Далее при анализе температурных зависимостей теплопроводности пленок с $D = 1.6$, 0.42 мкм мы фиксируем ориентацию $\{J\} = \{100\}$ и параметры зеркальности соответственно $P_{\{100\}} = 0.48$, 0.29. Как видно из рис. 3, при температурах выше 50 К значительную роль в теплосопротивлении играют ангармонические процессы рассеяния. В этих расчетах мы используем параметры ангармонических процессов рассеяния, определенные в [7] (см. табл. 1).

С ростом температуры роль различных ветвей фононного спектра в теплопроводности пленок значительно изменяется. Эти изменения обусловлены главным образом дисперсией тепловых фононов, а также дрейфовым движением продольных фононов. Как видно из рис. 3, при $T < 54$ К доминирующий вклад в теплопроводность вносит медленная поперечная мода (рис. 3, кривая *8*). При $T = 20$ К ее вклад составляет 48 %, а вклад быстрой моды — 42 %. Наличие протяженных плоских участков в спектре медленной поперечной моды t_2 при $q_{max}/2 < q < q_{max}$ (см., например, рис. 1 в [25]) приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к значительному уменьшению ее вклада в теплопроводность с повышением температуры. В противоположность этому, вклад быстрой поперечной моды t_1 с повышением температуры возрастает быстрее и при $T > 54$ К становится больше вклада моды t_2 (рис. 3, кривая *8*). Поэтому во всем интервале температур от 54 до 350 К доминирующий вклад в теплопроводность вносит поперечная мода t_1. Для поперечных фононов диффузионный вклад в теплопроводность во всем интервале температур значительно превосходит вклад дрейфового движения.

Вклад продольных фононов в теплопроводность при $T = 20$ К мал — он составляет 10 %. Одна-

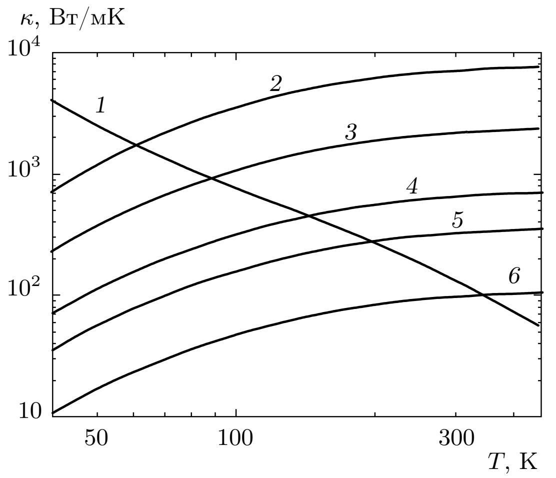

Рис. 4. Температурные зависимости теплопроводности для пленок с ориентацией {100} для объемных механизмов релаксации (кривая *1*) и для граничного рассеяния в пленках с параметрами $D = 1.6$ мкм, $L = 8$ мкм, $P = 0.48$ (кривая *2*); $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм, $P = 0.29$ (кривая *3*); $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$, $P = 0.14$ (кривая *4*); $D = 0.05$ мкм, $L = 100D$, $P = 0.14$ (кривая *5*) и $D = 0.02$ мкм, $L = 100D$, $P = 0$ (кривая *6*)

ко с повышением температуры этот вклад быстро возрастает, главным образом за счет дрейфового движения, и при $T > 200$ К становится сравнимым с вкладом медленной поперечной моды (рис. 3, кривая *11*). При $T < 60$ К дрейфовый вклад в теплопроводность оказывается значительно меньше диффузионного. Однако в интервале температур от 100 до 300 К для продольных фононов доминируют нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и дрейфовый вклад в теплопроводность значительно превосходит диффузионный (рис. 3, кривые *10*, *11*). Вклады дрейфового движения фононов в полную теплопроводность пленок с $D = 1.6$ мкм и $D = 0.42$ мкм при $T = 100$ К составляют 15 %, а при $T = 300$ К они достигают соответственно 26 % и 28 %. С уменьшением толщины пленки относительный вклад продольных фононов в теплопроводность возрастает. Однако для пленок с $D = 1.6$, 0.42 мкм он остается меньше вклада медленной поперечной моды. Как видно из рис. 3, учет дрейфового движения продольных фононов позволяет согласовать результаты расчета теплопроводности пленок с экспериментальными данными [5].

На рис. 4 приведены температурные зависимости теплопроводности для пленок различной толщины в режиме граничного рассеяния фононов ($\nu = \nu_B$, кривые *2–6*) и в режиме объемных механизмов релаксации фононов ($\nu_v = \nu_{iso} + \nu_U + \nu_N$, кривая *1*). Пересечение этих кривых дает температуры T_{BV} перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации. При этой температуре вклады в теплосопротивление, обусловленные граничным рассеянием и объемными механизмами, сравниваются и граничное рассеяние обеспечивает 50 % полного теплосопротивления. Численный анализ показал, что для кремниевых пленок с $D = 1.6$ мкм и $D = 0.42$ мкм температуры перехода T_{BV} составляют соответственно 61 и 89 К. Уменьшение толщины пленки и параметра зеркальности приводит к увеличению роли граничного рассеяния и к достаточно быстрому возрастанию температуры перехода T_{BV}. Так, например, уменьшение толщины пленки (при остальных фиксированных параметрах) до значений $D = 0.1$, 0.05 мкм при $P = 0.14$ дает соответственно $T_{BV} = 143$, 196 К, а для $D = 0.02$ мкм при $P = 0$ имеем $T_{BV} = 345$ К. При комнатных температурах вклады граничного рассеяния для пленок с $D = 1.6$, 0.42, 0.1, 0.05, 0.02 мкм составляют соответственно 2, 6, 17, 29, 58 %. Итак, граничное рассеяние фононов играет существенную роль в теплопроводности достаточно тонких пленок при комнатных температурах.

Рассмотрим и сравним температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым и квадратным сечениями. В работе [8] отмечалось, что длины свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины с круглым и квадратным сечениями при равенстве площадей поперечных сечений различаются менее чем на 1 %. Поэтому представляет интерес рассчитать температурные зависимости теплопроводности нанопроводов с квадратным сечением и сравнить их с экспериментальными данными [4] и с результатами, полученными в [7] для нанопроводов диаметрами 56 и 115 нм в интервале температур от 20 до 300 К. Мы полагаем, что сторона квадрата D и радиус R нанопровода определяются из условия $D = \sqrt{\pi}\,R$, а их длины совпадают. Параметр зеркальности отражения для нанопроводов взят одинаковым, $P = 0.15$. Как видно из рис. 5, результаты расчетов для нанопроводов с квадратным и круглым сечениями [7] хорошо согласуются друг с другом и с экспериментальными данными [4]: при $T = 20$ К различие двух расчетов составляет 3.7 %, а при $T = 300$ К — 0.6 %, что значительно меньше погрешности эксперимента. При этом хорошо согласуются не только полные теплопроводности, но и вклады всех колебательных мод, а также дрейфового и диффузионного движений фо-

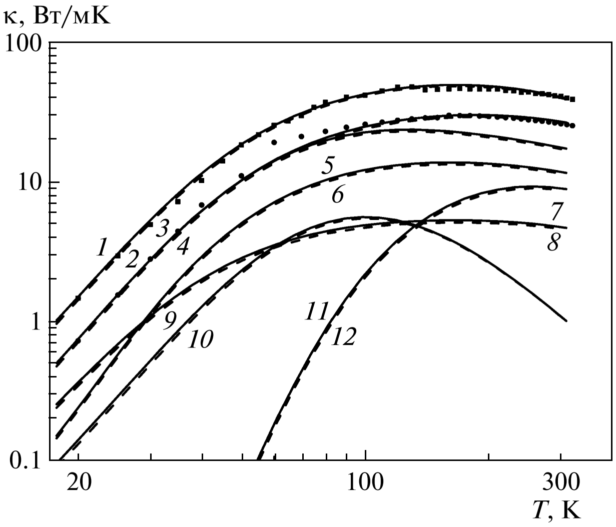

Рис. 5. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым (сплошные кривые *1, 3*) и квадратным (штриховые кривые *2, 4*) поперечными сечениями, равными по площади ($D_n = \sqrt{\pi} R_n$) для $2R_1 = 115$ нм (кривые *1, 2*) и $2R_2 = 56$ нм (кривые *3, 4*), а также вкладов в теплопроводность для нанопроводов с $D_2 = \sqrt{\pi} R_2$, $2R_2 = 56$ нм от быстрых поперечных фононов (кривые *5, 6*), от медленных поперечных фононов (кривые *7, 8*), от диффузионного движения продольных фононов (кривые *9, 10*) и от дрейфового движения продольных фононов (кривые *11, 12*). Символы — экспериментальные данные [4]

нонов (см. рис. 5). Эти результаты свидетельствуют о том, что аналитические решения для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах [8, 9] вполне адекватны реальной ситуации и могут быть использованы при интерпретации особенностей фононного транспорта в наноструктурах различной геометрии.

4. УГЛОВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР

Проанализируем изменение анизотропии теплопроводности пленок различной ширины ($\mu = 1$, 10, 100) с повышением температуры. Параметр зеркальности отражения возьмем $P = 0.14$, длина пленки считается фиксированной, $L = 100D$, а $D = 0.1$ мкм. Определим ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальную или минимальную теплопроводность в плоскости пленки. Для этого рассмотрим изменение угловых зависимостей теплопроводности $\kappa^{\{J\}}_{[I(\psi)]}(T)$ при вращении градиента температуры в плоскости пленок для различных ориентаций $\{J\}$. При $\mu = 1$, или $W = D$ имеем нанопровод с квадратным сечением. Поэтому развитая нами аналитическая теория дает нам уникальную возможность исследовать изменение анизотропии теплопроводности при переходе от нанопровода ($\mu = 1$) к достаточно широким пленкам ($\mu = 100$) при фиксированной температуре. На рис. 6 приведены такие зависимости для двух температур, 20 и 320 К, и трех ориентаций плоскостей пленок, $\{J\} = \{100\}, \{110\}, \{111\}$.

Рассмотрим сначала особенности фононного транспорта в кремниевых нанопроводах с квадратным сечением. Зависимость величин теплопроводности от ориентации боковых граней нанопровода мала. В случае, когда ось вращения и градиент температуры фиксированы и направлены вдоль [111], анизотропия теплопроводности, обусловленная изменением ориентаций боковых граней нанопровода, составляет менее 0.1 %. Для направления оси вращения и градиента температуры [100] анизотропия теплопроводности не превышает 0.8 %. В противоположность этому, изменение направления теплового потока относительно осей кристалла приводит к значительной анизотропии теплопроводности. При вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа [001], и обеспечивается медленной поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 6*а* и 6*в*). В направлениях [110] и [111] угловые зависимости теплопроводности имеют локальные максимумы, которые обусловлены соответственно фокусировкой быстрой поперечной и продольной мод (см. рис. 6*в*). При $T = 20$ К отношения значений теплопроводности для симметричных направлений составляют

$$\kappa^{\{110\}}_{[100]} : \kappa^{\{110\}}_{[110]} : \kappa^{\{110\}}_{[111]} = 1.73 : 1.14 : 1.$$

При комнатных температурах, благодаря объемным механизмам релаксации, анизотропия теплопроводности значительно уменьшается:

$$\kappa^{\{110\}}_{[100]} : \kappa^{\{110\}}_{[110]} : \kappa^{\{110\}}_{[111]} = 1.1 : 1.01 : 1.$$

При вращении градиента температуры в плоскости $\{111\}$ угловые зависимости теплопроводности имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной моды в направлениях типа [110] (см. рис. 6*д*). Анизотропия теп-

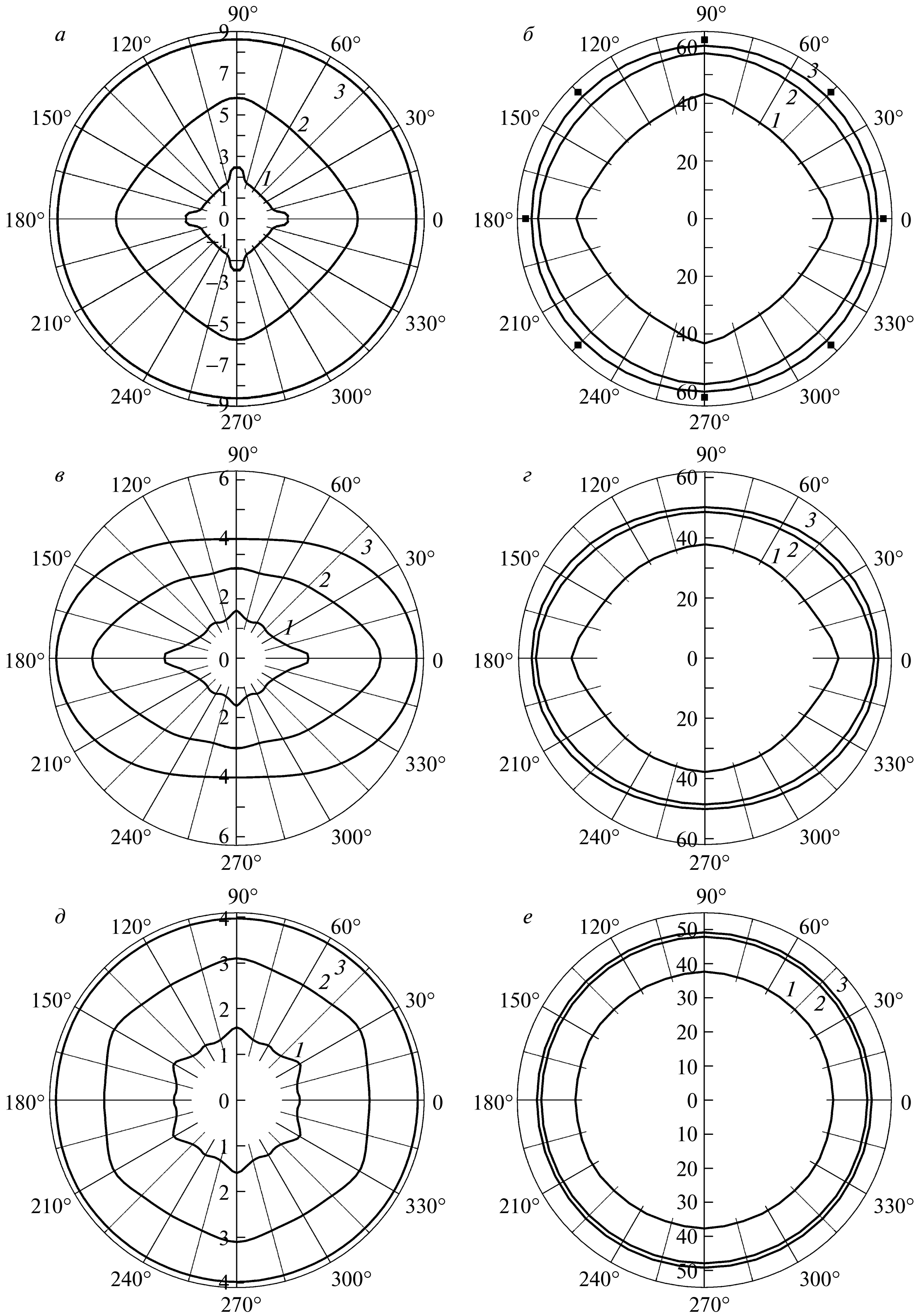

Рис. 6. Угловые зависимости теплопроводности (Вт/мК) кремниевых пленок с $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ для температур 20 К (*а, в, д*) и 320 К (*б, г, е*) для ориентаций плоскостей пленок $\{J\} = \{100\}$ (*а, б*), $\{110\}$ (*в, г*), $\{111\}$ (*д, е*), рассчитанные для $\mu = 1$ (кривые *1*), 10 (кривые *2*), 100 (кривые *3*). Символы — экспериментальные данные [6]

лопроводности в кремниевых нанопроводах с квадратным сечением обеспечивается, главным образом, медленной поперечной модой, для которой отношение $\kappa_{[100]}^{t2\{110\}}/\kappa_{[110]}^{t2\{110\}}$ равно 2.9, 2.2, 1.8 при температурах соответственно 20, 100, 320 К. Проведенный анализ показал, что для нанопроводов уменьшение анизотропии теплопроводности с ростом температуры обусловлено главным образом уменьшением вклада медленной поперечной моды в полную теплопроводность (см. рис. 5, кривые *7, 8*). Ее вклад при $T = 20$ К составляет 48 %, тогда как при комнатной температуре — 18 %.

В противоположность нанопроводам, анизотропия теплопроводности в достаточно широких пленках связана, главным образом, с ее зависимостью от ориентации плоскости пленки. Как видно из рис. 6, угловые зависимости теплопроводности кремниевых пленок при вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ значительно отличаются как друг от друга, так и от рассчитанных для нанопроводов. С ростом ширины пленок величины теплопроводности значительно увеличиваются по сравнению с нанопроводами. Так, например, при $T = 20$ К изменение параметра μ от 1 до 100 приводит к возрастанию величин теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}}$ с плоскостью $\{100\}$ в направлениях [100] и [110] соответственно в 3.53 и 5.35 раза. Для плоскости $\{110\}$ величины теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}}$ в направлениях [100] и [110] возрастают соответственно в 2.50 и 2.51 раза.

Увеличение ширины пленки приводит к качественному изменению угловых зависимостей теплопроводности по сравнению с нанопроводами: зависимость теплопроводности от направления потока тепла ослабляется. Для пленок с плоскостями $\{100\}$ и $\{111\}$ при $\mu = 100$ она становится почти изотропной, хотя при $\mu = 10$ небольшая анизотропия еще остается (см. рис. 6*а*, 6*б*, 6*д*, 6*е*): при $T = 20$ К для наноструктур с $\mu = 1$, 10, 100 отношения $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu)/\kappa_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ оказываются равными соответственно 1.52, 1.19, 1.00 (см. табл. 2). Следует отметить, что максимальные значения теплопроводности достигаются для ориентации $\{100\}$, а минимальные — для ориентации $\{111\}$ (см. рис. 6). Для достаточно широких пленок Si ($\mu = 100$) при $T = 20$ К и $P = 0.14$ отношение теплопроводностей $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)/\kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ для этих ориентаций составляет 2.2 (см. табл. 2).

С увеличением температуры возрастает роль объемных механизмов рассеяния и анизотропия теплопроводности уменьшается. Так, например, для наноструктур с $\mu = 1$ и $\mu = 10$ отношение $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu)/\kappa_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ при $T = 320$ К уменьшается до значений соответственно 1.16 и 1.01 (см. табл. 2). С увеличением температуры ослабляется также анизотропия, связанная с зависимостью теплопроводности от ориентации плоскости пленки. Если при $T = 20$ К и $\mu = 100$ отношение теплопроводностей для ориентаций $\{100\}$ и $\{111\}$ равно 2.2, то при $T = 320$ К оно уменьшается до 1.2 (см. табл. 2). При этом вклад граничного рассеяния в теплосопротивление пленки с $D = 0.1$ мкм при комнатной температуре составляет 17 %. Для плоскости $\{110\}$ угловые зависимости $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в достаточно широких пленках принимают эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления [100]. Для этой ориентации при $T = 20$ К и $\mu = 1$, 10, 100 отношения значений теплопроводности $\kappa_{[100]}^{\{110\}}(\mu)/\kappa_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ составляет 1.51, 1.6, 1.51, а при $T = 320$ К оно уменьшается до значений соответственно 1.17, 1.16, 1.15 (см. табл. 2).

Итак, показано, что угловые зависимости теплопроводности качественно изменяются при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам. Во-вторых, при диффузном рассеянии на границах пленок Si наименьшей рассеивающей способностью и максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а максимальной рассеивающей способностью и минимальной теплопроводностью — пленки с ориентацией $\{111\}$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовано влияние фокусировки фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок и нанопроводов с квадратным сечением в трехмодовой модели Каллавея в интервале температур от 17 до 350 К. Показано, что температурные зависимости теплопроводности пленок с толщинами больше 20 нм могут быть описаны в рамках стандартного релаксационного метода с использованием трехмерного спектра тепловых фононов. Вычисленные нами времена релаксации фононов на границах позволили адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности пленок в интервале температур от 17 до 350 К. Проанализирована роль граничного и объемных механизмов релаксации фононов в теплопроводности. Определены температуры перехода от граничного к объемным механизмам релаксации из равенства их вкладов в теплосопротив-

Таблица 2. Отношения теплопроводностей кремниевых нанопленок и нанопроводов с квадратным сечением в симметричных направлениях для $D = 0.10$ мкм

T, К	μ	$\kappa^{\{100\}}_{[100]}/\kappa^{\{100\}}_{[110]}$	$\kappa^{\{110\}}_{[100]}/\kappa^{\{110\}}_{[110]}$	$\kappa^{\{110\}}_{[100]}/\kappa^{\{110\}}_{[111]}$	$\kappa^{\{100\}}_{[110]}/\kappa^{\{111\}}_{[110]}$
20	1	1.52	1.51	1.72	1.01
	10	1.19	1.60	1.50	1.58
	100	1.00	1.51	1.29	2.17
320.5	1	1.16	1.17	1.19	1.02
	10	1.01	1.16	1.12	1.16
	100	1.00	1.15	1.10	1.20

ление пленок. Показано, что уменьшение толщины пленки и параметра зеркальности приводит к увеличению роли граничного рассеяния и к достаточно быстрому возрастанию температуры перехода. Поэтому при комнатных температурах граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках играет существенную роль: его вклад в теплосопротивление для пленок с $D = 0.1$ мкм и $D = 0.02$ мкм составляет соответственно 17 % и 58 %. Анализ теплопроводности нанопроводов с квадратным и круглым сечениями показал, что при равенстве площадей поперечных сечений их температурные зависимости близки: различие составляет менее 4 % в интервале температур от 20 до 350 К.

Проведенный анализ показал, что дисперсия тепловых фононов оказывает значительное влияние на теплопроводность кремниевых пленок и нанопроводов. Наличие протяженных плоских участков в спектре медленных поперечных коротковолновых фононов приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к уменьшению их вклада в теплопроводность с ростом температуры. Проанализированы зависимости теплопроводности наноструктур от направлений теплового потока. Показано, что в достаточно широких нанопленках величины теплопроводности в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки, тогда как в нанопроводах с квадратным сечением они зависят главным образом от направления теплового потока. Определены оптимальные ориентации плоскостей пленок и направлений потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем как при низких, так и при комнатных температурах. Для получения максимальных значений теплопроводности необходимо использовать пленки с ориентацией {100}, а для получения минимальных значений — с ориентацией {111}. Анализ зависимостей теплопроводности от геометрических параметров показал, что интервал интенсивного роста теплопроводности с увеличением ширины пленки ограничен ее длиной. При значениях ширины пленки, в 10 раз превосходящих ее длину, зависимости теплопроводности выходят на насыщение.

Итак, проведенный в работе анализ убедительно показывает, что при изложении экспериментальных результатов по теплопроводности нанопленок и нанопроводов необходимо указывать геометрические параметры наноструктур, а также направление теплового потока и ориентацию плоскостей пленок относительно осей кристалла. Отсутствие такой информации (как это имеет место в обзорах [1–3]) создает значительные трудности при интерпретации экспериментальных данных. Полученные в работе результаты могут быть использованы для оптимизации работы кремниевых микросхем, а также при создании новых микроэлектронных устройств.

Авторы благодарят К. Е. Гудсона, М. Ашеги и В. Парка (K. E. Goodson, M. Asheghi, and W. Park), представивших экспериментальные данные по теплопроводности кремниевых пленок.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы «Спин» при поддержке Программы ОФН РАН (грант № 12-Т-2-1018), а также при поддержке гранта НШ-14.120.14.1540 Ведущей научной школы.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson et al., J. Appl. Phys. **93**, 793 (2003).

2. A. D. McConnell and K. E. Goodson, Ann. Rev. on Heat Transfer **14**, 128 (2005).

3. D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen et al., J. Appl. Phys. Rev. **1**, 011305 (2014).

4. D. Li, Y. Wu, P. Kim et al., Appl. Phys. Lett. **83**, 2934 (2003).

5. M. Asheghi, Y. K. Leung, S. S. Wong, and K. E. Goodson, Appl. Phys. Lett. **71**, 1798 (1997); M. Asheghi, M. N. Touzelbaev, K. E. Goodson et al., J. Heat Transfer **120**, 30 (1998).

6. W. Liu and M. Asheghi, Appl. Phys. Lett. **84**, 3819 (2004).

7. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, ЖЭТФ **145**, 292 (2014).

8. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин, ФТТ **55**, 24 (2013).

9. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, Physica B **416**, 81 (2013).

10. H. B. G. Casimir, Physica **5**, 495 (1938).

11. A. K. McCurdy, H. J. Maris, and C. Erlbaum, Phys. Rev. B **2**, 4077 (1970).

12. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, Phys. Stat. Sol. (b) **251**, 991 (2014).

13. B. Taylor, H. J. Maris, and C. Elbaum, Phys. Rev. Lett. **23**, 416 (1969).

14. H. J. Maris, J. Acoust. Soc. Amer. **50**, 812 (1971).

15. J. P. Wolfe, *Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids*, Cambridge Univ. Press, New York (1998).

16. H. J. Maris and S. Tamura, Phys. Rev. B **85**, 054304 (2012).

17. Y. F. Zhu, J. S. Lian, and Q. Jiang, Appl. Phys. Lett. **92**, 113101 (2008).

18. J. Callaway, Phys. Rev. **113**, 1046 (1959).

19. J. A. Krumhansl, Proc. Phys. Soc. **85**, 921 (1965).

20. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, ЖЭТФ **120**, 649 (2001); **121**, 558 (2002).

21. В. Л. Гуревич, *Кинетика фононных систем*, Наука, Москва (1980).

22. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1979).

23. Б. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский, *Теплопроводность полупроводников*, Наука, Москва (1972).

24. G. Nilson and G. Nelin, Phys. Rev. B **6**, 3777 (1972).

25. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин, ФТТ **55**, 1441 (2013).

26. S. Tamura, Phys. Rev. B **27**, 858 (1983).

27. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, ФТТ **49**, 1568 (2007).

28. А. П. Жернов, А. В. Инюшкин, УФН **171**, 827 (2001); **172**, 573 (2002).

29. C. Herring, Phys. Rev. **95**, 954 (1954).

30. L. Landau and J. Rumer, Sov. Phys. **11**, 18 (1937).

31. R. Berman, F. E. Simon, and J. M. Ziman, Proc. Roy Soc. London A **220**, 171 (1953); R. Berman, E. L. Foster, and J. M. Ziman, Proc. Roy Soc. London A **231**, 130 (1955).

32. Дж. Займан, *Электроны и фононы*, Изд-во иностр. лит., Москва (1962).

33. *Handbook of Semiconductor Silicon Technology*, ed. by W. C. O'Mara, R. B. Herring, and L. P. Hunt, Noyes Publ., Park Ridge, NJ (1990), p. 349.

34. Z. Aksamija and I. Knezevic, Phys. Rev. B **82**, 045319 (2010).

35. J. E. Turney, A. J. H. McGaughey, and C. H. Amon, J. Appl. Phys. **107**, 024317 (2010).

36. K. Fuchs, Proc. Cambr. Phil. Soc. **34**, 100 (1938).

37. E. H. Sondheimer, Adv. Phys. **1**, 1 (1952).

38. S. B. Soffer, J. Appl. Phys. **38**, 1710 (1967).

39. M. P. Zaitlin, L. M. Scherr, and A. C. Anderson, Phys. Rev. B **12**, 4487 (1975).

40. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, ЖЭТФ **146**, 525 (2014).