

ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ В КРЕМНИЕВЫХ МОП-ТРАНЗИСТОРАХ.

<https://doi.org/10.5281/zenodo.17498809>

Али Абдреймов

Амангул Арзиева

*¹Каракалпакский государственный университет имени Бердаха, ул. Ч.Абдиров
№1, 742012 Нукус, Узбекистан, **

Аннотация

Надежность полупроводниковых устройств в значительной степени определяется качеством исходного материала, а также методами технологической обработки. В процессе электронного транспорта передаются как электрический заряд, так и тепловая энергия. В металлических материалах тепло в основном переносится электронами, тогда как в полупроводниках основная часть тепловой энергии передаётся фононами, а вклад электронов в теплоперенос незначителен.

Ключевые слова

баллистический теплоперенос, фононный транспорт, квантовые проволоки, температурное распределение, тепловой нагрев устройств.

Введение

Современные исследования в области термоэлектрических преобразователей направлены на повышение их эффективности за счёт целенаправленного снижения теплопроводности при сохранении высокой электропроводности, что достигается применением наноструктур. Особенно перспективными считаются кремниевые квантовые проволоки [1,2], благодаря их совместимости с существующими интегральными схемами. Такие структуры могут применяться, например, для создания Пельтье-охладителей, интегрируемых непосредственно на кристалл, что позволяет эффективно отводить тепло от электронных компонентов. Несмотря на значительное количество работ, посвящённых анализу влияния коротко канальных эффектов на вольтамперные характеристики МОП-транзисторов [3-5], вопросы теплопередачи в этих устройствах до сих пор изучены недостаточно. Прямое измерение температурного распределения в нано размерных структурах затруднено, что делает особенно важным численное моделирование тепловых процессов. Расчёты теплопроводности традиционно базируются на уравнениях теплопереноса и тепловых эквивалентных схемах

[6–7], основанных на законе Фурье. Этот закон устанавливает, что тепловой поток пропорционален градиенту температуры и направлен от горячей области к холодной. С развитием новых структур, таких как UTB-MOSFET и FinFET, длина затвора уменьшается до 20 нм и менее. Это требует высокой точности при моделировании тепловых эффектов, особенно в условиях самонагрева. FinFET — это объемный транзистор с уникальной архитектурой, в основе которого лежит вертикальное кремниевое ребро (fin), формирующее канал. Такое конструктивное решение позволяет управлять проводимостью канала электрическим полем с нескольких сторон, что существенно повышает управляемость по сравнению с планарными MOSFET. FinFET-технология широко используется в микрочипах, применяемых в компьютерах, смартфонах, носимых и автомобильных устройствах. В отличие от традиционных МОП-транзисторов, FinFET демонстрирует лучшие характеристики при уменьшении длины затвора. Например, при LGATE < 90 нм наблюдается рост тока утечки, а при 28 нм — он становится критическим. FinFET позволяет снизить ток утечки и повысить плотность тока, благодаря чему обеспечивается высокая энергоэффективность и быстрое переключение. Размеры вертикального канала FinFET сопоставимы с длиной волны де Бройля, что приводит к проявлению квантовых эффектов. Поэтому при проектировании таких транзисторов необходимо учитывать не только размеры, но и их соотношения. Планарные МОП-транзисторы сталкиваются с ограничениями масштабирования: при длине затвора менее 30 нм даже идеальный диэлектрик не обеспечивает полного управления каналом, что приводит к утечке тока и ухудшению характеристик устройства. Всё это подчёркивает важность разработки новых подходов к анализу тепловых и электрических процессов в наноразмерных структурах. Тем не менее, как видно из рисунка 2, экспериментальные данные по теплопроводности (κ) тонких кремниевых пленок [12–13] охватывают в основном область, где толщина l_{Si} превышает 20 нм. В то же время сведения о тепловых свойствах ультратонких пленок, используемых в современных наноразмерных устройствах, крайне ограничены. Это указывает на существование существенных пробелов в понимании теплопереноса в таких структурах.

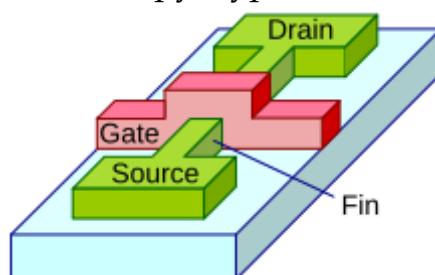


Рисунок-1 Устройство FinFET с двойным затвором

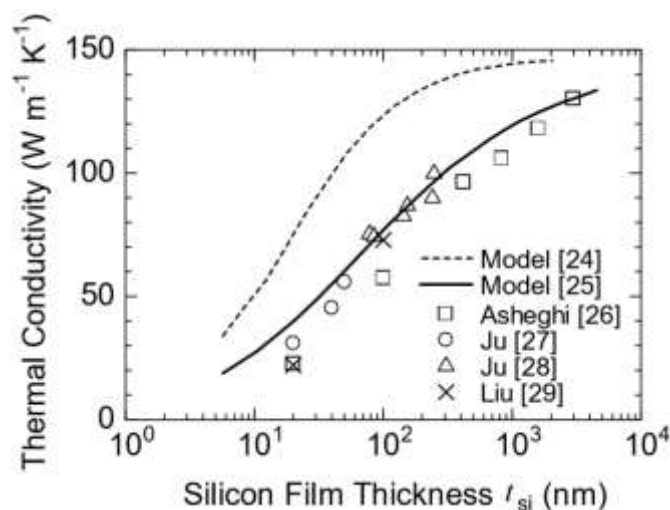


Рисунок 2: Сравнение модельной формулы теплопроводности κ в тонкой пленке Si [8,9] и экспериментальных значений [10–11]. l_{Si} — толщина пленки кремниевого полупроводника.

Снижение коэффициента теплопроводности (κ) при уменьшении размеров системы связано с усилением граничного рассеяния фононов. По мере миниатюризации структуры вероятность столкновений фононов с границами раздела возрастает, что приводит к заметному изменению тепловых свойств материала. Однако область исследований граничного рассеяния фононов остаётся недостаточно развитой: многие механизмы остаются неясными и требуют дальнейшего изучения. На сегодняшний день были разработаны две основные модели: модель акустического несоответствия [14], которая описывает отражение фононов на границе в соответствии с законом Снелла, и модель диффузионного несоответствия [15], основанная на эмпирическом подходе, где не учитывается направленность движения фононов. Оба подхода являются феноменологическими и пока не обеспечивают полного физического понимания процессов межфазного рассеяния. Преломление тепловой волны представляет собой изменение её направления на границе двух сред с разной скоростью распространения. Этот эффект также может проявляться в пределах одной среды, если её свойства неоднородны. Преломление описывается аналогом закона Снелла, как и для световых волн.

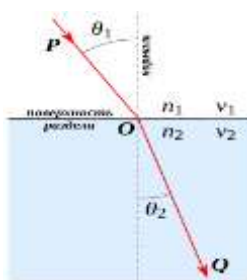


Рисунок-3 Преломление фанонов на границе раздела двух сред с показателями преломления n_1 и n_2 (на рисунке $n_1 < n_2$)

Феномен преломления объясняется законами сохранения энергии и импульса. При переходе волны из одной среды в другую её скорость изменяется, в то время как частота остаётся постоянной. В общем случае, преломление описывается законом Снеллиуса, аналогично преломлению света. Для выполнения теплового анализа на уровне реального устройства в данном исследовании был выбран метод расчёта, обеспечивающий высокую точность моделирования распространения тепла. Применение уравнения Больцмана для анализа переноса фононов позволяет существенно сократить вычислительные затраты по сравнению с методами молекулярной динамики, что делает возможным масштабирование расчётов на реальные наноструктуры. Кроме того, данный подход позволяет учитывать различные физические механизмы, влияющие на поведение фононов.

Благодаря своей гибкости и вычислительной эффективности, метод Больцмана в сочетании с методом Монте-Карло представляет собой перспективный инструмент анализа теплопереноса. В частности, метод Монте-Карло решает уравнение переноса напрямую, моделируя случайные траектории частиц на основе заданных вероятностных распределений. Например, чтобы оценить среднее расстояние между двумя случайными точками внутри круга, необходимо сгенерировать множество случайных пар точек, рассчитать расстояние между ними и определить среднее значение. Временные и пространственные характеристики частиц, такие как направление движения, энергия и время перемещения, задаются с помощью случайных чисел, что позволяет воспроизводить статистически достоверное поведение фононов. Таким образом, можно определить тепловые характеристики системы на основе усреднённых данных. Интерес к подобным моделям возрастает по мере уменьшения размеров устройств, и в будущем ожидается рост их значимости в практических применениях. В моделировании Монте-Карло фононы моделировались как частицы, а транспортные характеристики анализировались путем отслеживания броуновского движения группы. В данной работе мы предполагаем, что все частицы МК несут одинаковую тепловую энергию E^* . Тогда число частиц Монте-Карло N^* равно

$$N^* = \frac{U}{E^*} \quad (1)$$

Это выражается следующим образом. Здесь U — полная энергия фононов, включенная в систему моделирования, а с использованием DOS:

$$U = V \sum_p \int d\omega \hbar \omega D_p(\omega) n(\omega) \quad (2)$$

Оно дается следующим образом. Здесь V — объем моделирующей системы. Каждой частице МК была дана информация о векторе направления u , который представляет направление движения фонона, и о состоянии фонона, то есть ω , p и положении r . В данном исследовании направление движения u в начальном состоянии определялось из следующего уравнения, предполагающего, что кристалл ведет себя изотропно, без учета анизотропии кристалла (см. рисунок 4(б)).

$$u = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta) \quad (3)$$

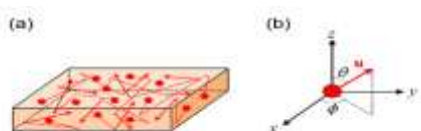


Рисунок 4: (а) Концептуальная схема моделирования фононного МК. Кружочки — это МК-частицы, каждая из которых представляет $W(\omega)$ -фононы. (б) Определение направления движения u частицы МК в исходном состоянии. Оно определялось с помощью уравнения (3).

Здесь $\sin\theta = R_1$, $\cos\theta = 2R_1 - 1$, $\phi = 2\pi R_2$, а R_1 и R_2 — равномерные случайные числа в $[0,1]$. Энергия E^* одной частицы МК не обязательно должна быть равна фактической энергии фонона $\hbar\omega$, она считается виртуальной частицей, представляющей собой комбинацию нескольких фононов; Число фононов, существующих в кристалле, огромно, и добиться однозначного соответствия между фононами и МК-частицами нереально, поскольку это требует большой вычислительной нагрузки. Поэтому, предположив, что одна частица МК таким образом представляет собой совокупность нескольких фононов, мы значительно снизили вычислительную нагрузку. Число фононов в каждой частице МК выражается с помощью следующей весовой функции.

$$W(\omega) = \frac{E^*}{\hbar\omega} \quad (4)$$

Определив весовую функцию, которая обратно пропорциональна частоте фононов ω , как показано в этом уравнении, энергию всех частиц МК можно установить на постоянное значение E^* . Кроме того, в предыдущих отчетах по моделированию фононных МК [2,6–17] веса рассматривались как

постоянные значения, но причина определения выше упомянутых весовых функций в этом исследовании.

Важную роль играет рассеяние на границах. По мере роста температуры все больше продуцируется коротковолновых фононов (большие значения q). Возрастает роль рассеяния таких фононов на дефектах.

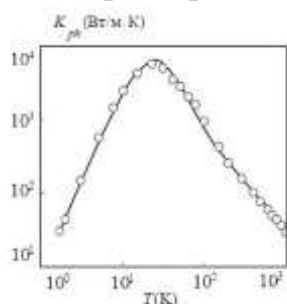


Рисунок 5 – Температурная зависимость решеточной теплопроводности кремния: экспериментальные точки по [17], расчетная кривая по [16].

По мере приближения температуры к дебаевской заселяются все фононные моды и дальнейшее увеличение температуры уже не увеличивает числа мод. Более того, высокие температуры порождают U-процессы рассеяния и теплопроводность начинает падать.

Первое ключевое отличие между электронами и фононами заключается в ширине энергетических зон. Для электронов ширина энергетических зон значительно превышает значение kT , и при комнатной температуре заселяются только уровни, расположенные вблизи дна зоны проводимости. В то время как ширина фононных дисперсий примерно соответствует kT , поэтому при той же температуре практически все акустические моды в пределах зоны Бриллюэна оказываются заселёнными. В результате модель Дебая, применимая для описания акустических мод, не демонстрирует такой же универсальности, как параболическая модель дисперсии, успешно используемая для описания электронов. Второе важное различие связано с принципами заселённости энергетических уровней. Для электронов это определяется так называемым фермиевским окном, и, следовательно, зависит не только от температуры, но и от положения уровня Ферми. В противоположность этому, фононные моды заселяются исключительно в зависимости от температуры. Именно по этой причине электрическая проводимость различных материалов может изменяться в широком диапазоне, тогда как теплопроводность варьируется сравнительно незначительно — лишь на несколько порядков.

Таким образом, предложенный подход к определению распределения тепла позволяет с высокой надёжностью оценить этот важнейший параметр — теплоперенос в наноплёнках в баллистическом режиме. Это, в свою очередь, даёт возможность точно определить параметры токовых путей

(шнуров), что критически важно для оценки надёжности работы полупроводниковых транзисторов, функционирующих в условиях рассеяния фононов на границах раздела.

ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures. Phys. Rev, 1959, vol. 11, no. 4, pp. 1046– 1051.
2. Holland M. G. Analysis of lattice thermal conductivity. Phys. Rev, 1963, vol. 132, no. 6, pp. 2461–2471.
3. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. . Thermal Conductivity of Bulk and Thin-Film Silicon: A Landauer Approach. J. Appl. Phys, 2012, vol. 111, p. 093708.
4. Gang Chen. Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons. New York: Oxford University Press: 2005, p. 560.
5. Займан Дж. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах. М.: ИИЛ, 1962. 488 с.
6. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Высшая школа, 1974. 478 с.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела, тома 1 и 2. М.: Мир, 1979.
9. Mohr M., Maultzsch J., Dobardžić E., Reich S., Milošević I., Damnjanović M., Bosak A., Krisch M., Thomsen C. Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering. Phys. Rev. B., 2007, vol. 76, no. 3, p. 035439/7.
10. Елецкий А. В., Искандарова И. М., Книжник А. А., Красилов Д. Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // УФН. 2011. Т. 181. С. 227-258.
11. Katsnelson M. I. Graphene: Carbon in Two Dimensions. New York: Cambridge University Press, 2012. 366 p.
12. Кругляк Ю. А. Обобщённая модель электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрёма // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. 2013. Т. 11, № 3. С. 519–549.
13. Schwab K., Henriksen E. A., Worlock J. M., Roukes M. L. Measurement of the quantum of thermal conductance. Nature, 2000, vol. 404, pp. 974–977.
14. Jeong C., Kim R., Luisier M., Datta S., Lundstrom M. On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients. J. Appl. Phys., 2010, vol. 107, p. 023707.

15. Tagaev M., Abdreymov A. Modern state of physics in the research of microplasma breakdown in silicon p-n junctions and diodes and schottky. 2023 EPRA.IJRD | Journal.DOI:<https://doi.org/10.36713/epra.2016>. | <https://epraajournals.com/> | 344 |

16. Jeong C., Datta S., Lundstrom M. Full Dispersion versus Debye Model Evaluation of Lattice Thermal Conductivity with a Landauer Approach. J.Appl.Phys, 2011, vol. 109, p. 073718/8

17. Glassbrenner C.J., Slack G.A. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3° K to the Melting Point. Phys. Rev.,1964, vol. 134, no. 4A, p. A1058.