УДК 538.9, 536.2.01, 536.21

О ПРОБЛЕМАХ РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ многослойных структур И КОНТАКТНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ИНТЕРФЕЙСОВ

*Баринов Александр Алексеевич, к.т.н., доцент,* [*barinov@bmstu.ru*](mailto:barinov@bmstu.ru)

*Хвесюк Владимир Иванович, д.т.н., профессор,* [*khvesyuk@bmstu.ru*](mailto:khvesyuk@bmstu.ru)

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** Показано, что в задачах расчета интенсивности теплообмена в твердотельных структурах, построенных на элементах микро- и наномасштаба, одной из ключевых является проблема учета граничного эффекта. Появление граничного эффекта связано, во-первых, с морфологией реальной поверхности образца (шероховатостью поверхности, геометрией отдельных слоев) и, во-вторых, с существенным влиянием взаимодействия переносчиков тепла с границей образца на теплоперенос. Предложены подходы к комплексному учету граничного эффекта при расчете эффективной теплопроводности пленок и контактного термического сопротивления интерфейсов.

**Ключевые слова:** эффективная теплопроводность, контактное термическое сопротивление, морфология поверхности, шероховатость.

Введение

Одной из тенденций в приборостроении и материаловедении является минитюаризация и применение структурных элементов наномасштаба и низкоразмерных структур [1]. В таких объектах ключевую роль в теплопередаче наряду с размерным и квантово-размерным эффектом начинают играть процессы рассеяния переносчиков теплоты на границах образца – так называемый граничный эффект. При этом возникает фундаментальная задача по созданию достоверных и надежных методов расчета и прогнозирования теплофизических свойств. В данной работе проводится анализ влияния факторов, оказывающих определяющее влияние на интенсивность теплообмена на примере двух задач: 1) расчет теплопроводности при распространении тепла вдоль пленок (трубок, нитей – каналов) нанометровой толщины; 2) расчет контактного термического сопротивления при распространении тепла поперек интерфейса (области контакта между двумя твердыми телами).

Результаты исследования

В рамках проведенного исследования можно выделить следующие ключевые тезисы

1. Для расчета теплофизических свойств применяется кинетическая теория фононов (формализм Ландауэра) [2], в соответствии с которой учет граничного эффекта происходит через длину свободного пробега  для определения эффективной теплопроводности плёнок и через коэффициент переноса  для определения контактного термического сопротивления интерфейсов.

2. Из анализа ряда экспериментальных работ по исследования теплопроводности наноструктур и контактного термического сопротивления [3] установлено, что интенсивность теплообмена напрямую зависит не только от средней квадратичной шероховатости поверхности  (средняя «высота» шероховатости), но также и от интервала корреляции  («длины» шероховатости). Проблема заключается в том, что существующие модели базируются на однопараметрическом задании шероховатости поверхности [3] через так называемый параметр зеркального отражения, учитывающий либо только «высоту», либо «длину» шероховатости.

3. Предложен принципиально новый подход – описание шероховатой границы с помощью модели статистически случайного профиля [2,3]. При этом рассматриваются распределения градиентов (углов) наклона профиля, а не линейные геометрические размеры шероховатости. К примеру, при рассмотрении случайной двумерной поверхности, для которой углы наклона распределены по закону Гаусса, описание шероховатой поверхности строится на задании среднего угла наклона профиля шероховатой поверхности, который определяется как . Преимущество модели – одновременный учет среднеквадратичного значения шероховатости  (высоты) и интервала корреляции  (длины).

4. Проблему расчета взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями твёрдых тел [2,3] предлагается решить на основании приближения Кирхгофа – рассмотрении касательных плоскостей, от которых происходит отражение переносчиков тепла (фононов в полупроводниках и диэлектриках) при взаимодействии с каждой точкой шероховатой поверхности и определении углов отражения от такой поверхности. Данный подход, во-первых, позволяет обобщить общепринятые методы расчета теплофизических свойств на случай реальной шероховатой границы раздела при помощи простых модификаций (см. п. 3). Во-вторых, он предоставляет инструмент для определения проводимости Капицы и эффективной продольной теплопроводности и изучения влияния шероховатости на интенсивность теплообмена (см. п. 1).

Выводы

Показана необходимость анализа шероховатости поверхности при экспериментальном определении теплопроводности и контактного термического сопротивления. В настоящее время этому вопросу не уделяется должного внимания, опытные данные весьма скудные. Во-первых, требуется оценка параметров профиля реальной (шероховатой) поверхности наноструктур – среднеквадратичной шероховатости (средней высоты) и длины корреляции (базовой длины), комбинация которых образует среднеквадратичный угол наклона профиля. Во-вторых, необходимо изучение профиля поверхности наноструктур (определение вероятностной плотности распределения углов наклона), так как на данный момент общепринятым является распределение Гаусса и требуется подтверждение его применимости для различных поверхностей наноструктур и интерфейсов, в том числе с атомарной шероховатостью.

Список использованных источников

1. Khvesyuk, V.I., Barinov, A.A., Liu, B. et al. Fundamentally New Approaches for Solving Thermophysical Problems in the Field of Nanoelectronics. // Russ Microelectron. 2023. Vol. 52, pp. 798–804.
2. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. A new technique for modelling phonon scattering processes at rough interfaces and free boundaries of solids. // J. Phys.: Conf. Ser. 2022. Vol. 2150. Art.no. 012021. 6 p.
3. Баринов А.А. Разработка метода расчета теплопроводности тонких пленок на основе статистических моделей взаимодействия фононов с шероховатыми границами наноструктур: авт. дис. ... к-та. техн. наук: (01.04.14). М., 2022. 18 с.

**ON THE PROBLEMS OF CALCULATING THE EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY OF MULTILAYER STRUCTURES AND THE CONTACT THERMAL RESISTANCE OF INTERFACES**

***A.A. Barinov, V.I. Khvesyuk***

**Abstract.** One of the key problems of calculating the intensity of heat transfer in solid-state micro- and nanostructures is the boundary effect. The boundary effect is associated, firstly, with the morphology of the real surface of the sample (surface roughness and etc) and, secondly, with the significant influence of the interaction of heat carriers with the sample boundary. Approaches to the integrated consideration of the boundary effect in calculating the effective thermal conductivity of films and the contact thermal resistance of interfaces are proposed.

**Key words:** effective thermal conductivity, contact thermal resistance, roughness.