

УДК: 530.1

## Теплоперенос в тонкой пленке с изменяющимися тепловыми свойствами в условиях периодического нагрева

Г.С. Асриянц, С.Н. Кравчун, О.Н. Третьякова

*Одним из актуальных направлений в физике конденсированного состояния является исследование свойств наноструктур, включающих в себя тонкие пленки на подложке. Интерес к таким системам обусловлен развитием микроэлектроники и нанотехнологий. Эффективным методом исследования тепловых свойств тонких пленок на подложке является метод периодического нагрева. В данной статье проведены расчёты амплитуды и фазы колебаний температуры для плёнки с теплопроводностью, которая резко уменьшается при приближении к границе с подложкой (в слое толщиной 1 мкм). Рассмотрена ситуация, которая возникает при исследовании сегнетоэлектрического фазового перехода. Показано, что при уменьшении перепада температуры на плёнке заметного влияния неоднородности плёнки на результаты измерения можно избежать.*

Данная работа направлена на дальнейшую разработку зондового метода периодического нагрева (МПН). В последние годы МПН интенсивно используется для исследования тепловых свойств тонких сегнетоэлектрических плёнок на подложке [2,3,4,5]. Одним из недостаточно изученных вопросов, возникающих при каждом конкретном исследовании, является вопрос об однородности плёнки и степени влияния неоднородности на результаты измерений.

Сущность метода состоит в нагреве тонкой металлической пленки (зонда), напыленной на исследуемый образец переменным током частоты  $\omega$ , мощность которого  $W = W_0 \cos 2\omega t$ . Исследуемая диэлектрическая пленка, в свою очередь, размещена на подложке, тепловые свойства которой известны рис.1. Радиотехническая регистрация амплитуды и фазы колебаний зонда позволяет измерять тепловые характеристики исследуемой пленки.

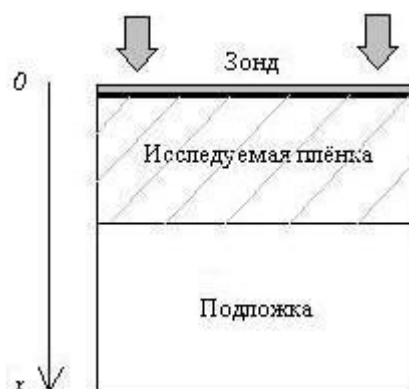


Рис.1. Структура образца, используемого для измерения тепловых свойств пленки

При обработке первичных экспериментальных данных используется теория метода, в которой заложено предположение о постоянстве тепловых свойств пленки и подложки. Вместе с тем есть основания считать, что свойства пленки зависят от координаты направленной по нормали к ее поверхности.

Нашей задачей является:

1. Разработать программу расчёта амплитуды и фазы колебаний поверхности неоднородной плёнки с подложкой, для случая плавного перехода теплопроводности от свойств плёнки, к свойствам подложки при уменьшении ширины зоны перехода.
2. Результаты расчёта сопоставить с данными для случая скачкообразного перехода. Рассчитать амплитуду и фазу колебаний для модели с убывающей, по мере приближения к границе с подложкой, теплопроводностью плёнки.
3. Рассчитать амплитуду и фазу колебаний для неоднородной плёнки вблизи сегнетоэлектрического фазового перехода.

### **Описание задачи о колебаниях температуры на поверхности образца с изменяющимися с глубиной тепловыми свойствами**

Решение уравнения теплопроводности с соответствующими краевыми условиями позволяет найти связь между амплитудой и фазой колебания температуры с тепловыми свойствами пленки.

Рассмотрим полубесконечную среду. Одномерное уравнение теплопроводности имеет вид

$$Cp\rho \frac{\partial}{\partial t} T(x, t) = \lambda \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x, t), \quad (1)$$

$$\text{где } T(x, t) = \theta(x) \cdot e^{2i\omega t} \quad (2)$$

Подставляем (2) в уравнение (1) и получаем

$$\frac{d^2}{dx^2} \theta(x) - \frac{2i\omega}{a} \theta(x) = 0, \quad (3)$$

где  $\lambda$  - теплопроводность,  $Cp$  - удельная теплоемкость,  $\rho$  - плотность,  $a = \frac{\lambda}{Cp\rho}$  - температуропроводность.

Для решения дифференциального уравнения (3) записываем характеристическое уравнение

$k^2 - \frac{2i\omega}{a} = 0$ , находим корни характеристического уравнения

$$k_{1,2} = \begin{bmatrix} (1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}} \\ -(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}} \end{bmatrix}$$

Решение дифференциального уравнения (3) имеет вид

$$\theta(x) = A1 \cdot e^{-(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}}x} + B1 \cdot e^{(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}}x} \quad (4)$$

Функция (4) отражает существование температурных волн в прямом и обратном направлениях оси  $x$ .

В полубесконечной среде, второе слагаемое соотношения (4) обращается в ноль и уравнение (4) примет вид

$$\theta(x) = A1 \cdot e^{-(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}}x} \quad (5)$$

Одним из граничных условий уравнения (1) является уравнение теплового баланса на поверхности пленки (при  $x=0$ ), т.е. используем граничное условие второго рода

$$\frac{W_0}{S} = -\lambda \frac{d}{dx} \theta(x) \Big|_{x=0} \quad (6)$$

В соотношении (6) теплоёмкостью металлической плёнки зонда считается пренебрежимо малой.

Подставляем выражение (5) в соотношение (6) и находим  $A1$

$$A1 = \frac{W_0}{S \cdot \lambda \cdot (1+i) \sqrt{\frac{\omega}{a}}}$$

Распределение температуры тогда будет иметь вид

$$\theta(x)_\infty = \frac{W_0 e^{-(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{a}}x}}{S \cdot \lambda \cdot (1+i) \sqrt{\frac{\omega}{a}}} \quad (7)$$

Таким образом, при периодическом нагреве полубесконечной среды с постоянными тепловыми свойствами комплексная амплитуда колебания температуры на поверхности определяется соотношением

$$\theta(0)_\infty = \frac{W_0}{S \cdot b \cdot (1+i) \sqrt{\omega}}, \quad (8)$$

где  $b = \frac{\lambda}{\sqrt{a}}$  – тепловая активность.

Рассмотрим численное решение задачи для неоднородной плёнки. Для расчета разобьём область перехода толщиной  $H$  на  $m$  слоев, и будем считать, что в пределах каждого слоя толщиной  $\frac{H}{m}$  тепловые свойства остаются неизменными.

Запишем условие равенства температур на границе между двумя слоями – слоем с номером  $n$  и с номером  $n+1$

$$A_n e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_n}} + B_n e^{\frac{(1+i)H_n}{l_n}} = A_{n+1} e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} + B_{n+1} e^{\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}}, \quad (9)$$

где  $l_n = \sqrt{\frac{a_n}{\omega}}$  – длина затухания температурной волны в слое  $n$ .

Воспользуемся условием равенства тепловых потоков на границе слоёв

$$-A_n \lambda_n \frac{1+i}{l_n} e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_n}} + B_n \lambda_n \frac{1+i}{l_n} e^{\frac{(1+i)H_n}{l_n}} = A_{n+1} \lambda_{n+1} \frac{1+i}{l_{n+1}} e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} + B_{n+1} \lambda_{n+1} \frac{1+i}{l_{n+1}} e^{\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} \quad (10)$$

Решая совместно два последних уравнения, получаем

$$B_n = \frac{e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_n}}}{2} \left[ A_{n+1} (1 + X_{n,n+1}) e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} + B_{n+1} (1 - X_{n,n+1}) e^{\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} \right] \quad (11)$$

$$A_n = \frac{e^{\frac{(1+i)H_n}{l_n}}}{2} \left[ A_{n+1} (1 - X_{n,n+1}) e^{-\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} + B_{n+1} (1 + X_{n,n+1}) e^{\frac{(1+i)H_n}{l_{n+1}}} \right] \quad (12)$$

Последний слой граничит с полубесконечной подложкой. В полубесконечной среде температурная волна распространяется только в одном направлении – в сторону от источника, в сторону увеличения координаты  $x$ . В силу этого коэффициенты  $A_{m-1}$ ,  $B_{m-1}$ , характеризующие волну в последнем слое определяются соотношениями

$$B_{m-1} = A_m \frac{(1 - X_{m-1,m})}{2} e^{-\frac{(1+i)H_{m-1}}{l_m}} e^{-\frac{(1+i)H_{m-1}}{l_m}} \quad (13)$$

$$A_{m-1} = A_m \frac{(1 - X_{m-1,m})}{2} e^{\frac{(1+i)H_{m-1}}{l_m}} e^{-\frac{(1+i)H_{m-1}}{l_m}} \quad (14)$$

Полученная система равенств позволяет по схеме итераций от  $n+1$  слоя к первому определить с учётом (6) все коэффициенты, включая  $A_1, B_1$ .

Таким образом, получается краевая задача, где заданы значения  $A_n$  и  $B_n$  (соответствуют слою подложки). Решая данную систему находим, соответственно,  $A_0$  и  $B_0$  (соответствуют исследуемому слою пленки).

Колебания температуры в  $i$ -ом промежуточном слое

$$\theta_i(\omega) = (A_i + B_i) \frac{-W \cdot l_i}{S \cdot \lambda_i \cdot [(1+i)(A_0 + B_0)]}, \quad (15)$$

где  $S$  - площадь поверхности между плёнкой и подложкой,  $W$  – мощность переменного тока,

$\lambda(i)$  - значение теплопроводности в  $i$ -ом слое,  $a_n = \frac{\lambda_n}{C_p \rho}$  - температуропроводность  $n$ -ого слоя.

Амплитуда и фаза колебания температуры на поверхности исследуемой пленки от частоты определяются соотношениями

$$\theta(\omega) = \sqrt{(\operatorname{Re}(\theta_o(\omega)))^2 + (\operatorname{Im}(\theta_o(\omega)))^2} \quad (16)$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\operatorname{Im}(\theta_o(\omega))}{\operatorname{Re}(\theta_o(\omega))} \quad (17)$$

На основе созданной программы с целью её обработки и проверки работоспособности проведены расчёты амплитуды и фазы колебаний температуры и сопоставлены результаты расчётов для случая плавного изменения  $\lambda$  в соответствии с функцией ошибок с последовательным уменьшением ширины перехода рис. 2. Результаты расчёта сопоставлены с решением задачи для случая скачкообразного изменения  $\lambda$ .

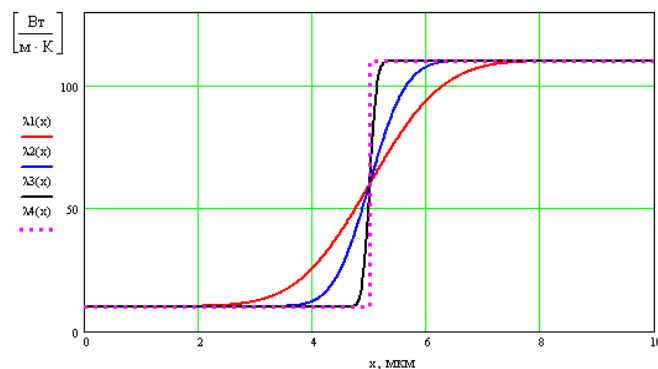


Рис. 2: Зависимость теплопроводности от  $x$  задаваемое функцией ошибок с разной шириной перехода и скачкообразная функция теплопроводности.

Расчёты проведены для плёнки толщиной  $H = 5$  мкм. Очевидно, что уменьшение ширины плавного перехода  $\lambda$  в пределе приводит к скачкообразному переходу. Результаты расчёта амплитуды и фазы колебаний температуры в этом процессе, также должны приближаться к

решению для скачкообразного изменения  $\lambda$ . Рис. 3-4 демонстрируют, что расчёты на основе составленной программы соответствуют этому очевидному утверждению.

Важным дополнительным выводом из представленных результатов расчёта является вывод о согласии абсолютных значений амплитуды и фазы колебаний температуры, соответствующих предельному случаю, и вычислений в соответствии с аналитическим решением для скачкообразного перехода.

На рис. 3 результаты расчёта приведены в виде отношения амплитуды колебаний температуры на поверхности плёнки с подложкой к амплитуде колебаний температуры на поверхности полубесконечной среды со свойствами плёнки при  $x=0$ .

Каждой амплитуде и фазе колебаний температуры, заданной определённый цветом линий на рис. 3-4, соответствует функция теплопроводности, заданная таким же цветом линии на рис. 2.

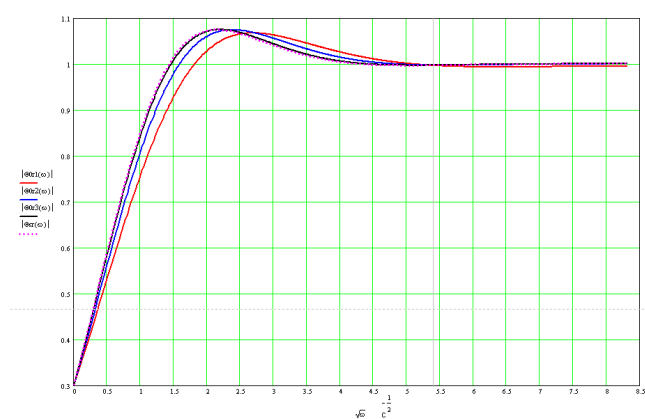


Рис. 3: Результаты расчёта относительных амплитуд колебаний температуры в зависимости от  $\sqrt{\omega}$  на поверхности однородной и неоднородной пленки с разной шириной перехода для теплопроводности.

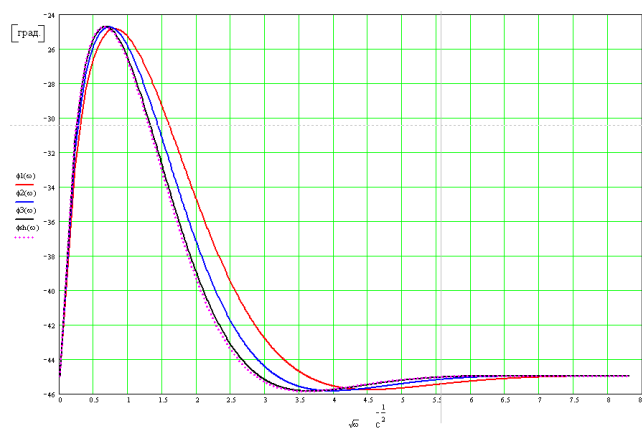


Рис. 4: Результаты расчёта фаз колебаний температуры в зависимости от  $\sqrt{\omega}$  на поверхности однородной и неоднородной пленки с разной шириной перехода для теплопроводности.

Одна из важных составляющих работы программы является вычисление оптимального количества разбиений плёнки на слои, чтобы результат вычисления программы соответствовал нужной погрешности рис. 5.

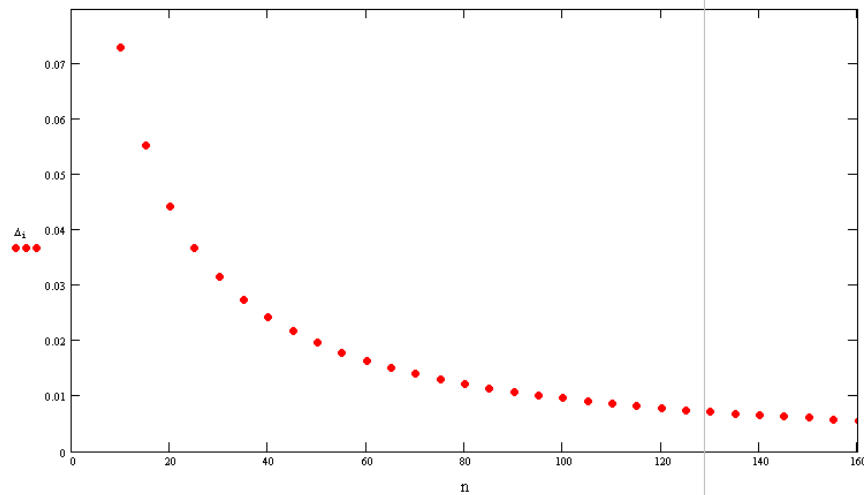


Рис. 5: Результат расчёта погрешности вычисления относительно  $n = 1000$  шагам разбиения (ось абсцисс – количество разбиений, ось ординат – доли процентов относительной погрешности).

Из рис. 5 следует, что разница в вычислениях между разбиениями на 40 и 80 частей примерно 1.5%, на 100 и 160 частей меньше 1%, следовательно, при расчёте наиболее хорошую точность можно получить при разбиении на 100 частей и более.

С использованием разработанной программы проведены расчёты амплитуды и фазы колебаний температуры для плёнки с теплопроводностью, которая резко уменьшается при приближении к границе с подложкой (в слое толщиной 1 мкм) рис. 6 а). Эта ситуация соответствует, по некоторым экспериментальным данным [5], случаю реального изменения  $\lambda$  на границе между плёнкой и подложкой.  $\lambda$ ,  $C_p$ ,  $\rho$  - плёнки и подложки взяты данные соответствующие сегнетоэлектрику ( $\text{BaTiO}_3$ ) и сапфиру ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) рис. 7 а),б), что соответствует эксперименту представленному в работе [2].

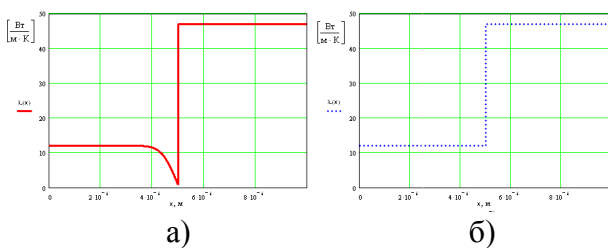


Рис. 6: Изменяющаяся, вблизи границы с подложкой, функция теплопроводности а) и скачкообразная функция теплопроводности б)

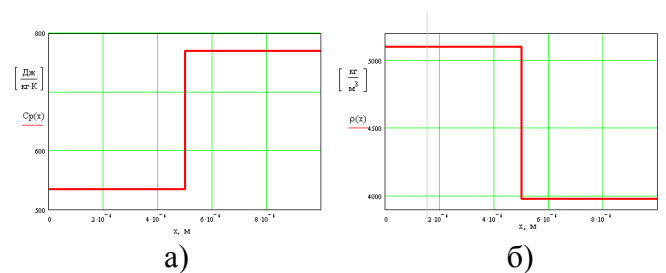


Рис. 7: Удельная теплоёмкость а) и плотность б).

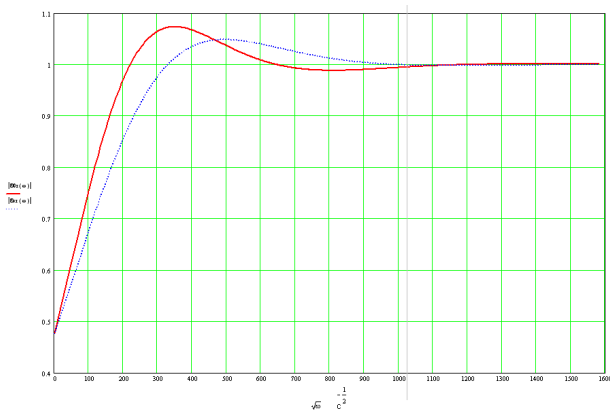


Рис. 8: Результаты расчёта относительной амплитуды колебаний температуры в зависимости от  $\sqrt{\omega}$  на поверхности плёнки, с изменяющейся вблизи границы с подложкой теплопроводностью, и при изменении теплопроводности скачком.

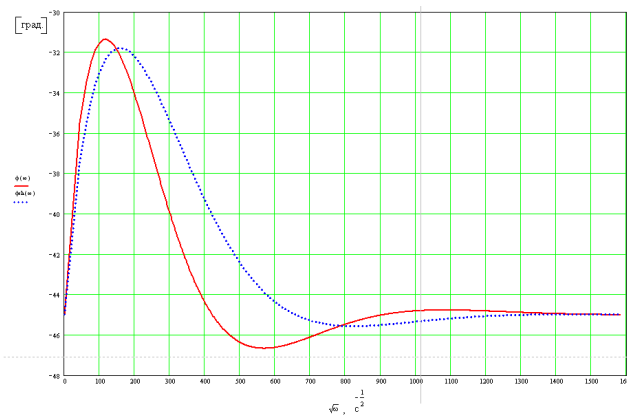


Рис. 9: Результаты расчета фазы колебаний температуры в зависимости от  $\sqrt{\omega}$  на поверхности плёнки, с изменяющейся вблизи границы с подложкой теплопроводностью и при изменении теплопроводности скачком.

Представленные на рис. 8-9 результаты расчёта демонстрируют существенное влияние неоднородности плёнки на амплитуду и фазу колебаний температуры в области низких и средних частот.

Рассмотрена ситуация, которая возникает при исследовании теплоёмкости плёнки  $\text{BaTiO}_3$  в области сегнетоэлектрического фазового перехода [2]. В области сегнетоэлектрического фазового перехода наблюдается резкое изменение  $C_p$  при увеличении температуры рис. 10, что приводит к неоднородности плёнки и зависимости её теплоёмкости от координаты  $x$ .

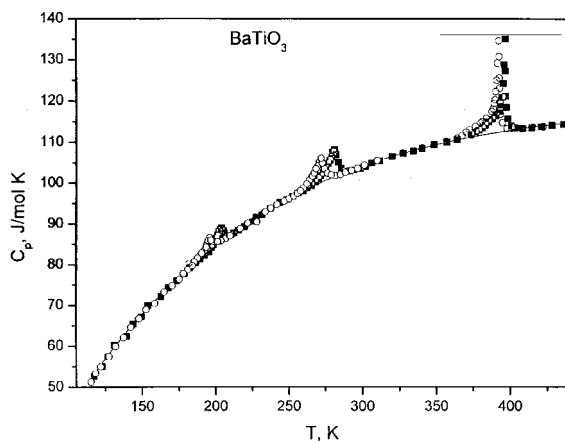


Рис. 10: Функция зависимости удельной теплоёмкости от температуры [2]

Показано, что при уменьшении мощности нагрева и, как следствие, перепада температуры на плёнке заметного влияния её неоднородности на результаты измерения амплитуды и фазы колебаний температуры можно избежать.

### Литература

1. Филиппов Л.П. Измерение теплофизических свойств веществ методом периодического нагрева. М.: Энергоатомиздат, 1984. -104 с.



2. С.Т. Давитадзе. Исследование размерных эффектов в тонких сегнетоэлектрических плёнках зондовым методом периодического нагрева: Автореферат дисс. к.ф.-м.н// МГУ.-М.:2004.-28 с.
3. Кравчун С.Н., Давитадзе С.Т., Мизина Н.С., Струков Б.А. Измерение тепловых свойств тонких диэлектрических пленок зондовым методом периодического нагрева.1. Теория метода// Физика твердого тела, 1997, т.39, №4, с.762-767.
4. Давитадзе С.Т., Кравчун С.Н., Струков Б.А., Гольцман Б.М., Леманов А.А., Шульман С.Г. Экспериментальное исследование тепловых свойств тонких пленок зондовым методом периодического нагрева.// Физика твердого тела.-1997, том 39, №7, с.1299-1302.
5. S.-M. Lee, D.G. Cahill Heat transport in thin dielectric films.// J. Appl. Phys. 1997, vol.81, №6, p. 2590-2595

---

#### СВЕДЕНИЯ О СОАВТОРАХ

Асриянц Георгий Сергеевич, аспирант кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета); Телефон: 354-66-95, e-mail: [xrun@land.ru](mailto:xrun@land.ru)

Кравчун Сергей Николаевич, доцент кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета), к. ф.-м. н.; Телефон: 347-23-15

Третьякова Ольга Николаевна, профессор кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета), к. ф.-м. н.; Телефон: 158-86-98, 8(916)542-03-18, e-mail: [tretiyakova\\_olga@mail.ru](mailto:tretiyakova_olga@mail.ru)