

ТЕРМОМЕХАНИКА НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

С. А. Филатов

Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Применение законов микромира к устройствам может привести к увеличению на порядки величин поверхностных и объемных соотношений. В большинстве инженерных систем преследуется стремление к миниатюаризации, что обеспечивается уменьшением размеров, веса и сложности устройства, и, как следствие, происходит снижение цены и улучшение рабочих характеристик. Недавние достижения в понимании транспортных явлений на микроуровне в области термо- и электропереноса обеспечили существенные расширения функциональных возможностей, касающихся этих явлений, при конструировании новых сенсорных систем и микроразмерных актуаторов.

Для обеспечения оптимальной работы таких устройств необходимы эффективный массоперенос реагентов, высокая электрохимическая активность и эффективная транспортировка продуктов функционирования ТЭ – тепла и воды. Все эти процессы являются химико-термическими поверхностными явлениями. Преобладание поверхностных эффектов – это одна из характеристик микротранспорта. Так как соотношение поверхность/объем для устройства с определяющими линейными размерами 1 м является примерно 1 м^{-1} , то соответствующее соотношение для 1 мкм устройства будет составлять 10^6 м^{-1} . Эффективное использование такого увеличения в соотношении поверхность/объем(масса) может привести к значительному уменьшению цены и улучшению электрохимического транспорта, а также тепло- и массопереноса.

Исследования транспортных явлений на микроуровне начались в конце 70-х годов в связи с сильной миниатюризацией интегральных микросхем и сопровождающей это явление необходимостью для рассеивания потоков больших энергий. Используя вынужденную конвекцию для микроканалов, вытравленных в силиконовой подложке, как показано на рисунке, были достигнуты тепловые потоки около 800 Вт/см^2 . Применяя такой подход к большим поверхностям, доступным для теплообмена получим выход в совокупной скорости диссипации тепла в радиаторе на порядок больше. За последние несколько лет микромасштабные явления и устройства нашли свое применение в микротепловых трубах, микротепловых двигателях, биореакторах, системах управления микропотоками жидкости.

Работа всех систем преобразования энергии основана на фундаментальных явлениях переноса, природа которых на макроуровне хорошо изучена. По теориям сплошных сред, которые разрешают описание обмена энергии и массы в таких системах, лежат сложные и независимые движения носителей энергии, которые непрерывно взаимодействуют. В газах и жидкостях диффузия и адвекция молекул объясняют важные свойства транспорта. В твердых телах необходимо объяснить движение электронов, фотонов, фононов.

Для систем, компоненты которых имеют физические размеры намного боль-

шие, чем расстояния, межчастичных взаимодействий для них (или процессы происходят медленнее времени взаимодействия), можно сформулировать адекватную теорию, опираясь на описание сплошной среды материалов в пределах локального термодинамического равновесия. Если размеры интересующей системы уменьшаются, и скорость ее функционирования возрастает, справедливость таких приближений сомнительна. Проблему нужно рассматривать глубже, чем локальное термодинамическое равновесие сплошной среды, а именно как обобщенную теорию транспорта.

При возникновении ситуаций, когда применима теория транспорта микрочастиц, уравнение Больцмана является необходимым основополагающим инструментом для описания явлений транспорта. Это уравнение имеет отношение к функции статистического распределения для ансамбля частиц, которая зависит от времени, координаты частицы, импульса. Уравнение устанавливает связь между пространственно-временной функцией статистического распределения и рассеянием, которое является следствием взаимодействия частиц (правая часть уравнения). Энерго- и массообмен может быть описан благодаря процессам переноса в микросистемах. Следовательно, решив уравнение для функции статистического распределения, можно перейти к механизму рассеяния (дисперсии)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial p} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{scat} . \quad (1)$$

Сила, приложенная к частицам, описываемая F , обычно присутствует только для заряженных частиц, таких как электроны и ионы.

Поскольку законы макротранспорта (Фурье, Ома, Фика) и все гидродинамические уравнения, относящиеся к массе, импульсу и сохранению энергии, так же как и уравнение лучистого переноса, могут быть выведены из уравнения Больцмана при макродопущениях, то это подтверждает универсальность законов. Не менее тяжелая задача – разработка способов решения уравнения для функции статистического распределения. При упрощающих допущениях получены решения, которые успешно описывали множество явлений микроуровневого переноса.

Большинству энергетических установок, независимо от размеров, необходим поток жидкости для переноса тепла и вещества. Должное понимание микроразмерной гидромеханики является предпосылкой для понимания и предсказания тепло- и массопереноса. Решение уравнения Больцмана является невозможным в большинстве практических приложений для потоков жидкостей. В ситуациях, когда средняя длина свободного пробега l мало сравнима с характеристическим масштабом потока L , поток жидкости может быть аппроксимирован как сплошная среда, поток находится недалеко от термодинамического равновесия. Соответствующее гидродинамическое уравнение Навье–Стокса может быть выведено из уравнения Больцмана или непосредственно из законов сохранения вещества и импульса.

Отношение средней длины свободного пробега к характерному размеру известно как число Кнудсена $Kn = l/L$. Как правило, при сплошном приближении $Kn \ll 0.001$. В микропотоках обычно встречаются большие числа Кнудсена. Как следствие, для $0.001 \leq Kn \leq 0.1$ традиционные граничные условия нескольжения

между твердой и жидкой фазой больше неприменимы и скорость проскальзывания (и соответствующее условие перескока в энергетическом уравнении) должно быть задано. Описание «видимой» вязкости для моделирования жидкостных потоков остается существенной проблемой.

Общее свойство микро- и наномасштабных явлений – это существенная характеристика транспорта через поверхности, границы и границы раздела в сравнении с характеристиками транспорта по всему объему в конкретных материалах. Испарение, теплообмен и транспорт веществ через мениск границы раздела жидкость–пар становятся более значимы, чем транспорт через жидкостный слой. Аналогично исследование природы течения электронов, фононов и фотонов через многослойную полупроводниковую структуру имеет большее значение (и является определяющим из-за несоответствия в физических свойствах между слоями), чем свойства слоев сами по себе.

Как и в первом приближении, допустим, что если размер конкретного слоя уменьшен, общее сопротивление переносу должно также уменьшиться, так как материал становится тоньше. Рассмотрим для примера общее термическое сопротивление пассивационного слоя в электронном устройстве

$$R_{\text{общ}} = \frac{d}{k} + R_{\text{гран}}, \quad (2)$$

где d – толщина слоя, k – температуропроводность материала.

Первое слагаемое относится к теплопроводности материала, второе – к термическому сопротивлению на границе раздела. Благодаря обработке слоев микроструктура сама по себе изменяется с толщиной, хотя материал может состоять и из одинаковых химических компонентов, но методика обработки диктует его структуру и характеристики. Так как эффекты на границе раздела, методы изготовления, температура и основные свойства материала могут противодействовать или усиливать транспорт, то существуют значительные возможности по конструированию в микромасштабах. Почти во всех случаях эта оптимизация начинается с моделирования неравновесных процессов и их применения к определенным системам. Это значит, что пока ТЭ первого порядка конструируется просто как ТЭ микронных размеров, улучшение рабочих характеристик при конструировании может быть возможно только через усовершенствование всеобщего понимания *micro-scale transport phenomena*. Необходимо это объединить усилия, направленные на разработку процессов по осуществлению микроконструирования с дополнительными исследованиями в фундаментальной теории микроразмерного теплообмена. Современная микротехнология определяет набор способов, которые могут изменять материал подложки таким образом, что из тонкой плоской основы она становится сложной структурой из нескольких материалов. Аддитивные процессы делают возможным осаждение тонких пленок на подложку путем влажного осаждения, распыления и шелкотрафаретной печати. Субтрактивные процессы включают в себя избирательное травление или эрозию областей структуры на основе сухого или влажного травления. Комплексное MEMS-устройство создается путем последовательных производственных шагов, на которых используются как аддитивные, так и субтрактивные процессы для получения необходимой структуры из первоначальной основы. Часто используются вспомогательные материалы, которые добавляются на ранних стадиях производственного процесса

для создания мембран и мостов, а затем они удаляются.

Плоскостные размеры MEMS-устройств ограничены только размерами и структурной прочностью выбранной подложки. Поэтому, в принципе, можно создать довольно большое устройство на подложке. Толщина подложки может меняться, и благодаря методам осаждения кристалл может быть сделан любой толщины. Толщина субстрата может колебаться в пределах от 20 до 500 мкм с отдельными деталями порядка 1 мкм .

Несистемный анализ MEMS-устройств незамедлительно обнаруживает очевидные параллели между основной геометрической формой MEMS и идеальной геометрической структурой проектируемых устройств. Как правило, MEMS-устройства основаны на модификации плоской подложки и включают в себя большое количество очень тонкослойных процессов для изготовления финального продукта. ТЭ достигает своей электрохимической функциональности благодаря поверхностному (химико-термическому) взаимодействию определенных веществ. MEMS-устройства, особенно химические сенсоры, имеют каналы для газа и жидкости.

Осаждение материалов на сформированную подложку представляет собой существенную проблему из-за относительной неизбирательности процессов осаждения. Осаждение дорогостоящих материалов на области, которые на более позднем шаге изготовления будут вытравлены и удалены, создает избыточную стоимость, а также, возможно, потребуется в дальнейшем проводить дорогостоящий процесс их восстановления. Рассмотренные вопросы являются вторичными даже на таком раннем этапе формирования структуры MEMS ТЭ, однако они являются существенным препятствием для практического развития данной технологии.

Таким образом, технологические процессы подчиняются принципам создания единой структуры, при этом исключается изготовление отдельных компонентов и последующая их сборка. Поэтому необходимы новые подходы к конструированию ТЭ.