

# 基于声子水动力学方程分析全环绕栅极晶体管的瞬态热输运过程\*

刘哲<sup>1)2)</sup> 魏浩<sup>1)</sup> 崔海航<sup>1)</sup> 孙锴<sup>3)†</sup> 孙博华<sup>2)4)‡</sup>

1) (西安建筑科技大学建筑设备科学与工程学院, 西安 710055)

2) (西安建筑科技大学力学技术研究院, 西安 710055)

3) (中国科学院微电子研究所, 北京 100029)

4) (中国科学院北京纳米能源与系统研究所, 北京 101400)

(2024年4月9日收到; 2024年5月28日收到修改稿)

相较于经典的傅里叶定律, 声子水动力学模型在描述纳米尺度超快声子热输运中已经展现出显著优势. 全环绕栅极晶体管 (GAAFET) 通过三维沟道设计极大优化了电学性能, 但其纳米尺度特征也导致自热问题和局部过热的挑战. 基于此, 本文针对纳米尺度 GAAFET 器件内的声子热传输特性开展理论和数值模拟分析. 首先, 基于声子玻尔兹曼方程严格推导了声子水动力学模型和边界条件, 建立了基于有限元的数值求解手段, 针对新型的 GAAFET 器件, 分析了表面粗糙度、沟道长度、沟道半径、栅极电介质、界面热阻等因素对其热传输特性的影响规律. 研究表明, 本文构建的连续介质框架下基于声子水动力学模型及温度跳跃条件的非傅里叶热分析方法能够精确预测 GAAFET 内部非傅里叶声子导热过程, 并揭示声子阻尼散射和声子/界面散射的作用机制. 这项工作为进一步优化 GAAFET 的热可靠性设计, 提高其热稳定性和工作性能提供了重要的理论支持.

**关键词:** 全环绕栅极晶体管, 声子水动力学模型, 温度跳跃, 非傅里叶热分析

**PACS:** 44.10.+i, 65.80.-g, 63.20.kg, 63.22.-m

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240491

## 1 引言

目前, 随着半导体芯片工艺制程的持续缩短, 传统的平面晶体管已经逐渐接近其物理极限. 全环绕栅极晶体管 (gate-all-around FET, GAAFET) 的沟道被栅极完全包围, 其三维环绕结构具有更好的沟道控制能力, 被认为是鳍式场效应晶体管 (FinFET) 之后的下一代主流晶体管技术<sup>[1-3]</sup>. 尽管 GAAFET 特征尺寸缩小至纳米级显著提高了集成度, 但是晶体管的体热源密度也随之增加, 导

致自热效应和局部过热问题日益凸显. 这些问题严重威胁到晶体管的可靠性及电学性能的进一步提升, 已成为芯片设计和热管理领域的痛点问题<sup>[4-6]</sup>. 因此, 深入研究和分析 GAAFET 的热分布特性, 对于理解其在实际工作条件下的热行为至关重要. 这不仅有助于揭示热效应对晶体管性能的具体影响, 而且对于设计有效的热管理策略、优化器件结构、提高晶体管的热可靠性具有重要的指导意义<sup>[7,8]</sup>.

GAAFET 晶体管的特征尺寸是纳米量级, 其声子散射作用控制的热输运过程发生了显著转变. 传统的由倒逆散射 (umaklapp scattering) 主导的

\* 国家自然科学基金 (批准号: 62374173) 和西安建筑科技大学优秀博士论文培育基金 (批准号: 2023XYBPY006) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sunkai1@ime.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: sunbohua@binn.cas.cn

扩散热输运向边界散射 (boundary scattering) 占主导的弹道热输运过渡. 这一转变使得经典的傅里叶定律在描述 GAAFET 晶体管中超快的热传导过程时受到局限. 为了精确捕捉纳米尺度下的热输运现象, 学者们使用微观方法 (如第一性原理<sup>[9]</sup>、分子动力学<sup>[10]</sup>) 描述低维材料的声子热输运过程. 一般来说, 微观方法的计算成本较高, 且只适用于简单的几何形状. 介观方法 (声子玻尔兹曼方程<sup>[11-13]</sup>) 很好地弥补了宏观傅里叶模型和微观方法之间的差距, 已成功应用于单器件的声子热分析计算, 但在处理堆叠器件/多器件和电-热-力多物理场耦合时, 其计算效率和计算量仍然难以满足工程界的复杂计算要求. 针对以上挑战, 有必要考虑宏观的非傅里叶导热模型, 如 M-CV 方程<sup>[14,15]</sup>、双相滞后方程 (DPL)<sup>[16,17]</sup>、弹道扩散方程 (BDE)<sup>[18]</sup>、“热质”方程<sup>[19,20]</sup>、Guyer-Krumhansl 方程 (GKE)<sup>[21,22]</sup> 以及声子水动力学方程 (PHE)<sup>[23]</sup> 等. 宏观的非傅里叶导热模型相比经典的傅里叶模型, 在一定程度上既弥补了宏观傅里叶模型预测不准的缺点, 同时在耦合其他物理场时具有显著优势, 且计算量和计算效率可满足工程要求. 其中, 声子水动力学方程综合考虑了非局域效应和弛豫效应, 并结合非平衡边界条件, 如温度跳跃边界<sup>[24,25]</sup>、热流密度切向滑移边界<sup>[6,26,27]</sup> 等, 已成功应用于鳍式场效应晶体管 (FinFET) 的非傅里叶热行为特征的表征<sup>[28,29]</sup>. 与 FinFET 相比, GAAFET 器件沟道的三维全环绕设计使其局部过热问题更为突出, 然而针对 GAAFET 器件的非傅里叶热分析的相关研究仍不够深入, 因此有必要分析 GAAFET 器件的热分布特性, 为其失效评估和热可靠性设计提供理论指导.

基于此, 本研究基于声子水动力学方程, 构建了适用于三维圆柱形 GAAFET 的非傅里叶导热模型, 并采用有限元方法求解柱坐标下的 PHE. 此外, 综合考虑边界声子散射作用, 在氧化物-半导体界面引入温度跳跃边界条件. 基于上述建立的求解手段深入探讨了表面粗糙度、沟道长度、沟道半径、氧化物栅极电介质以及界面热阻等因素对 GAAFET 局域热分布的影响. 研究结果不仅为 GAAFET 的热管理提供了新的视角, 也为 GAAFET 器件的热可靠性分析和设计提供了重要的基础数据和分析框架. 全文的结构安排如下: 第 2 节详细介绍了从声子玻尔兹曼方程到声子水动力学方程的推导和模型验证及 GAAFET 器件构型; 第 3 节展示了详

细的研究结果; 最后总结了研究结果, 并对未来的研究方向进行了展望.

## 2 研究方法和器件构型

### 2.1 物理模型和边界条件

#### 2.1.1 从声子玻尔兹曼方程到声子水动力学方程

在电介质材料和半导体材料中, 声子作为遵循玻色-爱因斯坦 (Bose-Einstein) 统计的玻色子<sup>[30]</sup>, 其散射过程可根据 (准) 动量守恒与否进行分类. 保持 (准) 动量的声子散射过程称为正规散射 (normal scattering), 简称为 N 散射; 而 (准) 动量不守恒的声子散射过程称为阻尼散射 (resistive scattering), 简称为 R 散射. 室温下, 由于声子模态间的相互作用相对较弱, N 散射的影响可以忽略, 主要考虑 R 散射过程. R 散射的声子达到热平衡时, 其分布遵循 Bose-Einstein 统计, 因此, 可以采用单弛豫近似的声子玻尔兹曼方程描述微纳尺度的声子导热过程<sup>[30,31]</sup>. 其表达式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = -\frac{f - f_R^{\text{eq}}}{\tau_R}, \quad (1)$$

其中,  $\tau_R$  是 R 散射的弛豫时间;  $f = f(\mathbf{x}, t, \mathbf{k})$  是声子分布函数,  $\mathbf{x}$  是空间位置,  $t$  是时间,  $\mathbf{k}$  是波矢;  $\mathbf{v}_g$  是声子的群速度, 可根据德拜模型假设的线性的声子色散关系得到,  $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})$ ,  $\omega$  是声子频率;  $f_R^{\text{eq}}$  是 R 散射的平衡态分布, 遵循 Bose-Einstein 分布函数:

$$f_R^{\text{eq}} = \frac{1}{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - 1}, \quad (2)$$

其中,  $\hbar = h/(2\pi)$ ,  $h$  是普朗克常数,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $T$  是温度.

通过对声子分布函数进行积分可得声子系统的宏观变量 (如声子的能量密度  $e$ 、热流密度  $\mathbf{q}$ 、热流密度的通量  $\mathbf{Q}$ ):

$$e = \int \hbar\omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{v}_g \hbar\omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (4)$$

$$\mathbf{Q} = \int \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \hbar\omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (5)$$

利用声子散射过程的守恒定律可进一步导出声子系统的宏观变量 (如能量密度  $e$ 、热流密度  $\mathbf{q}$ )

的平衡方程:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{Q} = -\frac{\mathbf{q}}{\tau_R}. \quad (7)$$

将方程 (1) 两边分别乘以声子的微观变量  $\mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \hbar \omega$  并在全波矢空间进行积分, 可得  $\mathbf{Q}$  的平衡方程如下:

$$\frac{\partial Q_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} M_{ijk} = \frac{1}{\tau_R} \left( \frac{1}{3} v_g^2 e \delta_{ij} - Q_{ij} \right), \quad (8)$$

式中,  $M_{ijk} = \int \mathbf{v}_{gi} \mathbf{v}_{gj} \mathbf{v}_{gk} \hbar \omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$  是  $\mathbf{Q}$  的通量, 是一个三阶张量.  $\delta_{ij}$  是克罗内克尔符号.

将 (8) 式进行尺度化 [32]

$$\frac{\partial Q_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} M_{ijk} = \frac{1}{\varepsilon \tau_R} \left( \frac{1}{3} v_g^2 e \delta_{ij} - Q_{ij} \right). \quad (9)$$

通过渐进展开, 可得热流密度通量的显式表达式:

$$Q_{ij} = \frac{1}{3} v_g^2 e \delta_{ij} + \frac{2}{15} \tau_R v_g^2 \frac{\partial q_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{1}{5} \tau_R v_g^2 \left( \frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \right). \quad (10)$$

将热流密度的通量表达式 (10) 式与 (7) 式联立, 可得如下的声子水动力学方程:

$$\tau_R \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} = -\kappa \nabla T + \frac{\Lambda^2}{5} \left[ \nabla^2 \mathbf{q} + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{q}) \right], \quad (11)$$

其中,  $\kappa$  是体热导率,  $\Lambda = v_g \tau_R$  是声子平均自由程,  $v_g$  是声子群速度. 热流密度弛豫项和非局域项分别描述了超快导热过程时间的非平衡效应和小尺度导热过程空间的非平衡效应. 直接对该方程求解较为困难, 可联立能量守恒方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = Q - C \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (12)$$

其中,  $Q$  是由于自热效应引起的热源,  $C$  是体积比热容. 将 (11) 式和 (12) 式联立可以得到, 轴对称柱坐标系下仅有温度变量  $T$  的控制方程:

$$\begin{aligned} \tau_R \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\kappa}{C} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{4\Lambda^2}{15} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{Q}{C} + \frac{\tau_R}{C} \frac{\partial Q}{\partial t} - \frac{4\Lambda^2}{15C} \Delta Q, \end{aligned} \quad (13)$$

考虑恒定热源, (13) 式可简化为

$$\begin{aligned} \tau_R \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\kappa}{C} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{4\Lambda^2}{15} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{Q}{C}, \end{aligned} \quad (14)$$

(14) 式精确地捕捉了纳米尺度下声子输运的瞬态特性, 揭示了一种双曲型的热传导机制. 与经典的傅里叶热传导方程相比, 该方程不仅考虑了空间上的热传递, 还同时纳入了时间维度的非平衡效应. 这种综合考虑为预测纳米尺度器件内部复杂的非傅里叶导热现象提供了更为精确的理论基础. 此外, 为了构建一个更为完整的数学模型, 下一节将进一步考虑声子与边界的散射作用, 这一过程对于全面理解微纳尺度下的热传导同样至关重要.

## 2.1.2 温度跳跃边界

温度跳跃条件考虑了半导体器件纳米结构材料之间界面附近的声子散射的性质, 表达式如下 [24,33]:

$$T - T_w = -d_w \Lambda \frac{\partial T}{\partial n}, \quad (15)$$

式中,  $T_w$  是边界上的温度跳变;  $n$  是界面的法方向;  $d_w$  的大小表述了氧化物和半导体材料之间的界面散射特性, 可表达为 [33]

$$d_w = \frac{R_{\text{TBR}} \cdot \kappa_{\text{eff}}(K_n)}{K_n \cdot L_c}, \quad (16)$$

其中,  $R_{\text{TBR}}$  是热边界热阻;  $L_c$  是栅极沟道的特征长度;  $K_n = \Lambda/L_c$  是克努森数. 此外, 为了描述纳米尺度下导热系数的降低, 并考虑声子-界面的散射过程, 提出了有效导热系数的解析模型,  $\kappa_{\text{eff}}$  是有效导热系数, 由下式确定 [34]:

$$\kappa_{\text{eff}}(K_n) = \kappa \left[ 1 - \frac{2K_n \cdot \tanh(1/2K_n)}{1 + C_w \cdot \tanh(1/2K_n)} \right], \quad (17)$$

其中,  $C_w = 2(1+p)/(1-p)$  是与 Ziman 镜面反射有关的无量纲系数.  $p$  称为镜面反射参数, 表示漫反射和镜面散射的概率, 表达式为 [35,36]:

$$p = \exp \left( -\frac{16\pi^2 \sigma_{\text{rms}}^2 \cos^2 \theta_i}{\lambda^2} \right), \quad (18)$$

其中,  $\lambda$  为声子的波长,  $\sigma_{\text{rms}}$  是表面粗糙度的均方根,  $\theta_i$  是声子的入射角度. 当  $\sigma_{\text{rms}} \ll \lambda$ , 且声子垂直入射时,  $p \rightarrow 1$  即  $C_w \rightarrow \infty$ , 对应纯镜面散射; 当  $p = 0$  时,  $C_w = 1$ , 声子散射则为完全漫反射, 此时材料的有效导热系数最低.

## 2.2 物理模型验证

大量研究已经证实, 声子玻尔兹曼方程 (BTE) 在预测微纳尺度的非傅里叶声子热输运现象方面具有显著的准确性 [11-13,24]. 为了验证本研究提出的声子水动力学模型的可靠性, 采用文献 [11] 中提及

的二维稳态声子导热问题和薄膜法向瞬态导热问题作为基准案例. 如图 1(a) 和图 1(b) 所示, 符号是采用 Lattice Boltzmann 方法 (LBM) 求解声子玻尔兹曼输运方程的结果, 而实线则展示了本研究中使用有限元方法求解声子水动力学模型得到的结果. 其中, 图 1(a) 中的参数  $y/L$  是一个无量纲化的垂直位置坐标. 对比分析两个案例的结果表明, 采用 PHE 和采用 LBM 得到的结果展现出较好的一致性, 从而有力地验证本文声子水动力学模型的有效性和准确性.

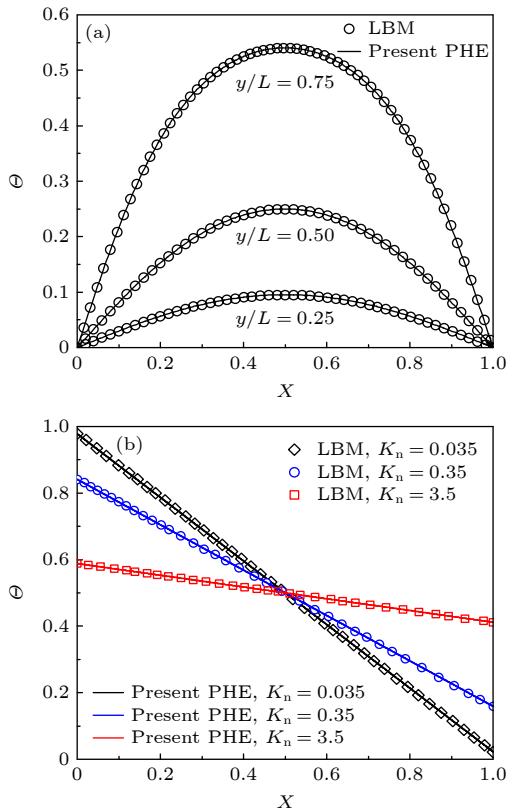


图 1 (a) 二维稳态声子导热问题的无量纲温度分布; (b) 薄膜法向瞬态导热问题的无量纲温度分布. 符号为文献 [11] 的 LBM 结果, 实线为当前声子水动力学方程的模拟结果

Fig. 1. (a) Dimensionless temperature distribution of the two-dimensional steady-state phonon thermal conductivity problem; (b) dimensionless temperature distribution of the normal transient thermal conductivity problem of the thin film. The symbols represent the LBM results in Ref.[11], and the solid lines represent the simulation results of current phonon hydrodynamics equation.

## 2.3 器件构型

全环绕栅极 (GAA) 是一种晶体管架构, 可克服 FinFET 架构的挑战, 在性能和功耗等方面更具有优势. 如图 2(a) 所示, 典型的圆柱形 GAAFET

三维结构由源极区、漏极区、沟道区、栅极电极区和栅极介电区等关键部分组成. 由于圆柱形 GAAFET 的几何对称性, 可将其简化为二维轴对称模型, 简化后的模型如图 2(b) 所示. 本研究进一步考虑采用数值模拟方法, 深入分析纳米尺度 GAAFET 的热输运特性. 在数值模拟过程中, 将 PHE 方程和温度跳跃边界相结合, 以精确反映 GAAFET 的声子热输运特性, 具体的边界设置在图 2(b) 有所体现. 模拟的初始条件设定为初始温度  $T_0 = 300$  K, 沟道区域的热源强度为  $Q = 10^{19}$  W/m<sup>3</sup>, 时间步长为  $\Delta t = 0.01$  ps. 此外, 表 1 详细列出了硅 (Si) 和介电材料 (二氧化硅 (SiO<sub>2</sub>)、氧化铝 (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)、氧化铪 (HfO<sub>2</sub>)) 的热物性参数.

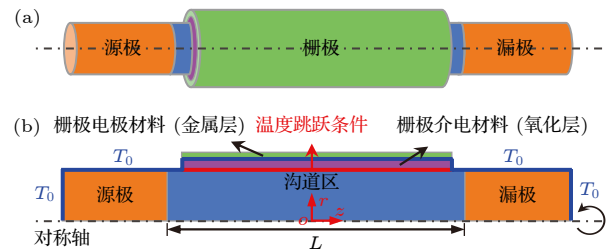


图 2 (a) 三维 GAAFET 的结构示意图; (b) 二维轴对称结构  
Fig. 2. (a) Schematic diagram of three-dimensional GAAFET structure; (b) two-dimensional axisymmetric structure.

表 1 Si 和介电材料 (SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfO<sub>2</sub>) 的热物性参数 [28,37]

Table 1. Thermal physical property parameters of Si and dielectric materials (SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfO<sub>2</sub>) [28,37].

相关参数	Si	SiO <sub>2</sub>	HfO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
$v_g / (\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	3000	5900	4800	8800
$\kappa / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	150	1.4	1.0	1.5
$C / (10^6 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	1.50	1.75	2.71	2.65
$\Lambda / \text{nm}$	100	0.4	0.23	0.19
$\tau_R = \Lambda / v / \text{ps}$	33.3	0.068	0.048	0.02
$R_{\text{TBR}} / (\text{m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{GW}^{-1})$	—	0.1	9.03	6.92

## 3 研究结果

### 3.1 表面粗糙度的影响

图 3 对比了在硅/氧化物界面处发生完全漫反射、混合反射和纯镜面反射对 GAAFET 器件内热传输行为的影响. 这里, 设置沟道长度为 5 nm. 结果表明, 在超快 ( $t = 30$  ps) 的声子热输运过程中, 热量从界面传递到氧化物一侧. 在图 3(a) 中, 界面

的表面粗糙度最大 ( $p = 0$ ), 在界面处发生完全漫反射, 此时有效热导率最小 (见 (17) 式), 界面处声子散射行为受到限制, 使得热量在界面附近发生累积. 随着表面粗糙度的减小, 此时  $p$  值有所增大, 在图 3(b) 中, 声子受到部分镜面反射的影响, 有效热导率也有所增加, 进而导致器件内的温度峰值有所降低. 进一步地, 在图 3(c) 中, 当界面为完全光

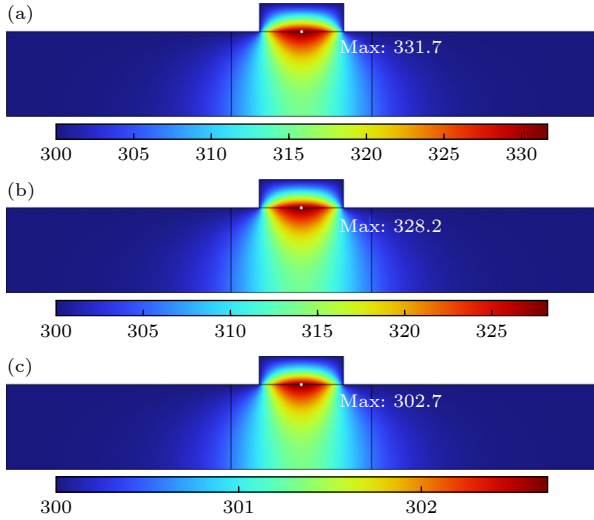


图 3  $t = 30$  ps 时刻 GAAFET 器件的表面温度分布 (a)  $p = 0$ ; (b)  $p = 0.1$ ; (c)  $p = 1$

Fig. 3. Temperature distribution of GAAFET devices at  $t = 30$  ps: (a)  $p = 0$ ; (b)  $p = 0.1$ ; (c)  $p = 1$ .

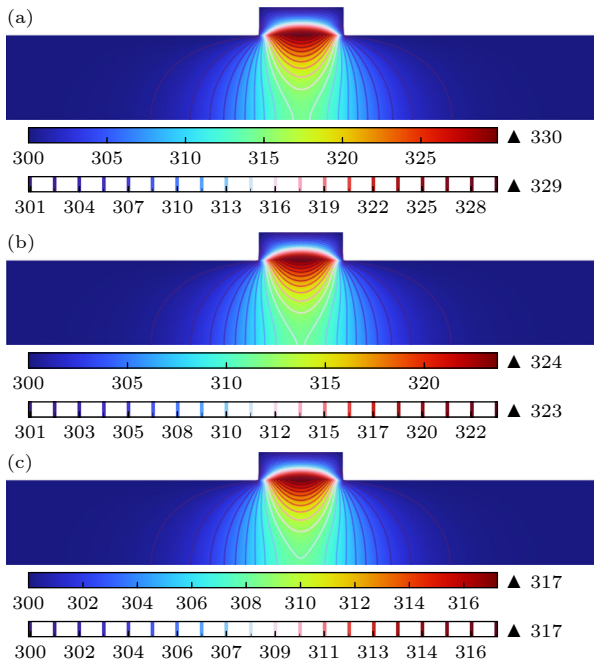


图 4  $t = 50$  ps 时刻 GAAFET 器件的等温线图 (a)  $p = 0.2$ ; (b)  $p = 0.4$ ; (c)  $p = 0.6$

Fig. 4. 2D Isotherm cloud maps of GAAFET devices at  $t = 50$  ps: (a)  $p = 0.2$ ; (b)  $p = 0.4$ ; (c)  $p = 0.6$ .

滑表面时, 即发生纯镜面反射 ( $p = 1$ ) 时, 有效热导率达到最大, 温度峰值进一步降低. 图 4(a)–(c) 显示了 ( $t = 50$  ps) GAAFET 器件在不同镜面反射参数下的温度等值线分布云图. 由于声子受到边界散射的限制, 在沟道区域内发生热量累积, 从而导致局部热点 (hot spot)<sup>[38]</sup>. 随着镜面反射参数  $p$  值从 0.2 增加至 0.6, 器件内部的最大温度从 330 K 降低到 317 K. 接下来着重关注镜面反射参数对热点的影响, 热点发生在源极和漏极之间的沟道区域附近, 可以看出镜面反射参数  $p$  的数值越大越有利于降低热点峰值温度. 因此, 减小表面粗糙度有助于增强界面处的散射能力, 维持较高的温度梯度, 使其更有效地传递热量.

### 3.2 沟道长度的影响

现有的实验手段难以观测到纳米器件内部源/漏极之间沟道区域的热输运过程, 因此可采用温度和热流密度分布的理论来探讨 GAAFET 内部的热行为. 图 5(a) 显示了  $p = 0.1$  下, 硅/氧化物界面

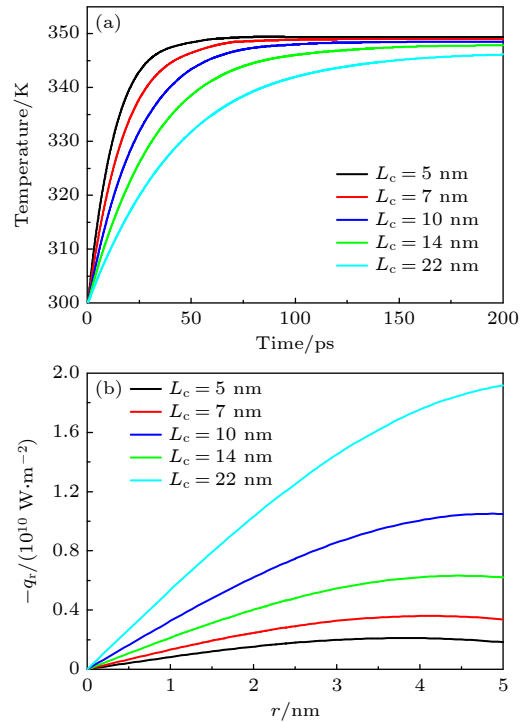


图 5 不同沟道长度的 GAAFET 器件的温度和热流密度变化 (a) 硅/氧化物界面中点处温度峰值的时间演变; (b)  $t = 200$  ps 时刻沿  $r$  方向中线上的径向热流密度分布

Fig. 5. Temperature and heat flux changes of GAAFET devices with different channel lengths: (a) Time evolution of temperature peak at the midpoint of the silicon/oxide interface; (b) radial heat flux distribution along the centerline in the  $r$ -direction at  $t = 200$  ps.

中点处温度峰值的时间演变. 结果表明, 当沟道长度由  $L_c = 22$  nm 降低为  $L_c = 5$  nm 时, 温度峰值由 346 K 上升到 349 K. 同时, 随着  $L_c$  的减小, 器件峰值温度不断升高, 器件到达峰值温度的时间也不断缩小. 这是因为随着沟道长度  $L_c$  的不断减小,  $K_n$  数值增大, 导致有效导热系数  $\kappa_{\text{eff}}$  会减小 (可由 (17) 式得到), 从而限制了热量的传递 [28,39]. 因此, 器件峰值温度随着沟道长度的减小而不断升高. 图 5(b) 显示了  $t = 200$  ps 时刻沿  $r$  方向中线上的径向热流密度分布. 对于不同的  $L_c$ , 径向热流密度的分布规律是相近的, 当  $r < 5$  nm 时, 径向热流密度  $q_r$  由硅/氧化物界面指向几何中心, 并在  $r = 5$  nm (即硅/氧化物界面) 达到  $10^{10}$  W/m<sup>2</sup>, 径向热流密度  $q_r$  随着  $L_c$  的增大而升高 (如图 5(b) 所示).

### 3.3 沟道半径的影响

接下来, 进一步分析栅极沟道区域半径对 GAAFET 内部热输运行行为的影响. 图 6(a) 显示

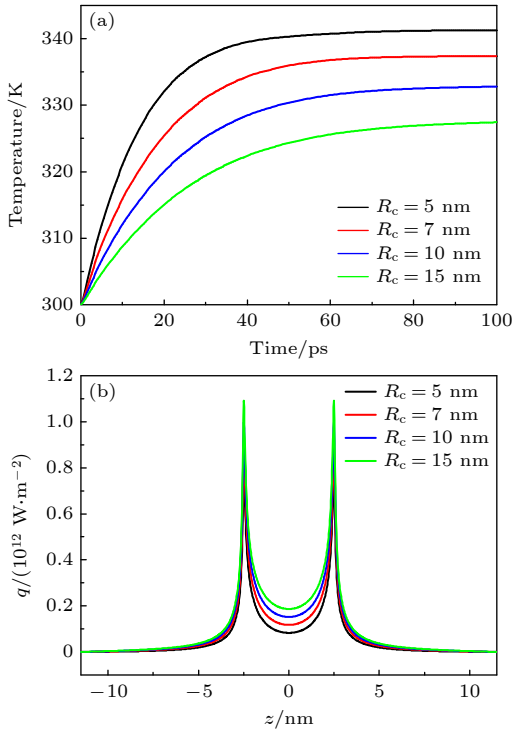


图 6 不同沟道半径的 GAAFET 器件的温度和热流密度变化 (a) 硅/氧化物界面中点处温度峰值的时间演变; (b)  $t = 50$  ps 时刻沿氧化物-半导体界面沟道长度上的热流密度分布  
Fig. 6. Temperature and heat flux variations of GAAFET devices with different channel radius. (a) Time evolution of peak temperature at the midpoint of the silicon/oxide interface; (b) the heat flux distribution along the channel length of the oxide semiconductor interface at time  $t = 50$  ps.

了不同沟道半径 (5, 7, 10, 14 nm) 的 GAAFET 内硅/氧化物界面中点处温度峰值的时间演变. 这里, 沟道长度为 7 nm, 克努森数可重新定义为  $K_n = A/R_c$ , 其中,  $R_c$  是沟道半径. 由图 6(a) 可分析出, 在  $t = 100$  ps 时, 随着沟道半径  $R_c$  的减小, 温度峰值有所上升. 与 3.2 节分析沟道长度的影响类似, 较小的沟道半径  $R_c$ , 意味着有效导热系数  $\kappa_{\text{eff}}$  减小, 热量在沟道区域内的传播更易受到抑制, 导致热量在局部区域积累. 图 6(b) 给出了  $t = 50$  ps 时刻沿硅/氧化物界面处的热流密度分布. 结果表明: 随着沟道半径  $R_c$  的减小, 热流密度  $q$  的峰值也不断减小. 由于热流密度的减小, 热量从沟道区域传递至周围区域的能力受限, 晶体管内部产生的热量更难以有效地传递至外部环境, 从而导致局域温度升高. 这一现象也称为“热点效应” [38], 即在晶体管的某些区域, 尤其是沟道区域, 会出现比周围区域更高的温度, 形成所谓的“热点”. 热点效应不仅会影响晶体管的性能, 还可能缩短器件的寿命, 甚至导致器件失效.

### 3.4 氧化物栅极电介质的影响

随着沟道区域特征尺寸的不断缩小, 为了提高器件的性能和稳定性, 降低功耗和漏电流, 并提高器件的可靠性, 通常需要选用高介电常数的栅极电介质材料. 对于典型的场效应晶体管, 工作温度是决定其失效模式和预期寿命的关键参数之一 [40]. 阿伦尼乌斯方程 ( $\eta = A \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)$ , 其中  $\eta$  是特征寿命,  $A$  为经验常数,  $E_a$  为激活能,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $T$  是绝对温度) 提供了器件的峰值热点温度与其热可靠性之间的关联性, 表明器件在较高温度下的性能衰减速率会加快. 基于这一理论, 本文对氧化物栅极电介质如何影响 GAAFET 器件的峰值温度进行了深入分析, 以评估其对提升器件热稳定性的作用. 图 7 绘制了三种不同氧化物 ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和  $\text{HfO}_2$ ) 作为栅极电介质材料的 GAAFET 内部的温度分布. 结果表明: 与  $\text{SiO}_2$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  氧化物相比, 采用  $\text{HfO}_2$  作为栅极氧化物的器件在内部温度峰值上表现得更低. 这一结果表明,  $\text{HfO}_2$  具有更优异的热稳定性, 能够在相对较高的温度环境中维持更稳定的电学性能, 这对于提高器件的可靠性至关重要. 尽管  $\text{SiO}_2$  因其与硅基底的卓越兼容性而在 GAAFET 中作为栅极电介质得到了广泛应用, 但其相对较低的介电常数限制了

其在进一步缩小器件尺寸方面的潜力. 因此, 寻找和开发具有高介电常数和良好热稳定性的新型材料, 如  $\text{HfO}_2$ , 成为了当前半导体材料研究的一个重要方向. 这些材料不仅能够满足日益严格的器件性能要求, 还能够较高温工作条件下提供更好的可靠性, 从而推动半导体器件向更高性能、更低功耗的方向发展.

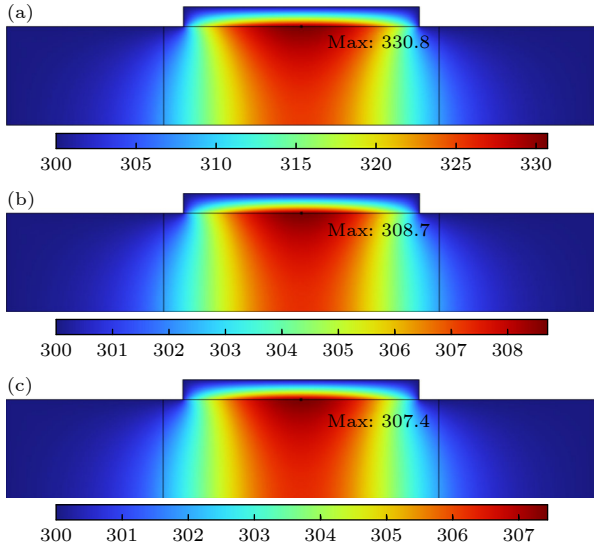


图 7 不同栅极电介质材料的 GAAFET 器件的温度云图 (a) Si- $\text{SiO}_2$ ; (b) Si- $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Si- $\text{HfO}_2$

Fig. 7. Temperature distribution of GAAFET devices with different gate dielectric materials: (a) Si- $\text{SiO}_2$ ; (b) Si- $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; (c) Si- $\text{HfO}_2$ .

### 3.5 氧化物界面热阻的影响

为了更好地理解热阻的影响, 可通过调整热阻的大小, 分析 GAAFET 沿径向中线上的温度分布和热流密度分布情况. 如图 8(a) 所示, 在  $t = 100$  ps 时刻, 随着热阻  $R_{\text{TBR}}$  从  $0.1 \text{ m}^2 \cdot \text{K}/\text{GW}$  增加到  $0.9 \text{ m}^2 \cdot \text{K}/\text{GW}$ , 硅/氧化物界面 ( $r = 5 \text{ nm}$ ) 的温度由  $334.9 \text{ K}$  升高至  $337.9 \text{ K}$ . 这一结果揭示了热阻对界面温度的显著影响: 较高的热阻会导致更高的温度升高, 从而可能引发热点效应, 这会降低器件的性能并缩短其寿命. 因此, 为了减少界面处的热点峰值, 降低热阻是至关重要的, 这有助于实现更有效的冷却和提高半导体器件的可靠性. 进一步观察图 8(b) 中的热流密度变化对比结果, 可以得到热流密度在硅/氧化物界面处达到最大, 并且随着热阻的减小, 热流密度相应增加. 这意味着较低的热阻可以引起更高的热流密度, 从而在 GAAFET 内部实现更好的热传输控制. 为了实现

低热阻并保持优异的热稳定性, 关键在于降低边界散射率. 界面热阻的大小可以通过调整界面散射的程度来有效调控. 在理想情况下, 当边界散射为镜面反射时, 声子能够无阻碍地穿过沟道区域, 从而实现低热阻和较弱的温升. 这种优化的热传输管理策略对于提升 GAAFET 的性能和可靠性具有重要意义, 尤其是在追求更高集成度和更小尺寸的现代集成电路设计中. 通过实施这些策略, 可以更好地控制和优化器件的热行为, 从而推动半导体技术向前发展.

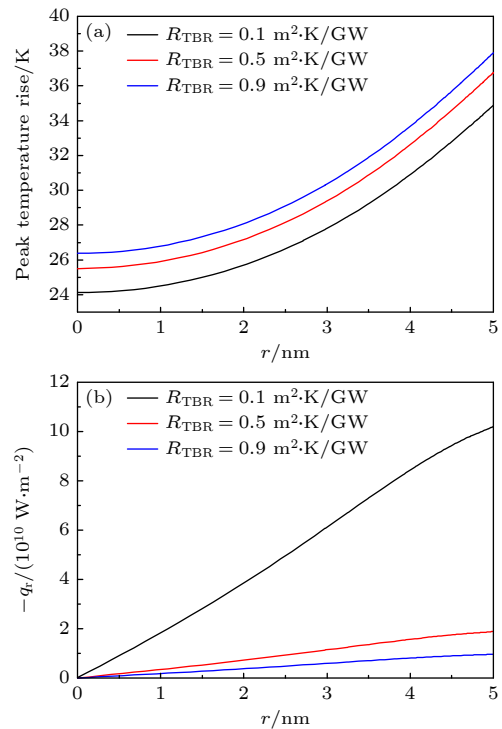


图 8  $t = 100$  ps 时不同热阻 GAAFET 沿  $r$  方向中线上的 (a) 温升和 (b) 径向热流密度变化

Fig. 8. (a) Temperature rise and (b) radial heat flux variation along the centerline of different thermal resistances GAAFET in the  $r$ -direction at  $t = 100$  ps.

## 4 总结与展望

### 4.1 总结

综上所述, 本文基于非傅里叶效应支配的声子水动力学模型, 对 GAAFET 中瞬态热输运过程进行了深入分析, 并全面评估了不同影响因素对其热特性的影响.

1) 在方法层面上, 基于声子玻尔兹曼方程严格推导了宏观声子水动力学方程, 将声子界面的散射作用与温度跳跃条件相关联, 构建了适用于纳米

尺度声子瞬态热输运特性的物理模型, 并采用有限元方法成功实现了模型的数值求解.

2) 在器件分析层面上, 基于上述方法求解了纳米尺度 GAAFET 器件的声子瞬态热输运过程, 刻画了皮秒量级下的热响应规律, 并获得了表面粗糙度、沟道长度、沟道半径、氧化层电介质材料和界面热阻等参数对 GAAFET 热分布特性的影响.

总之, 本研究强调了宏观架构下的非傅里叶导热模型和器件物性参数对半导体器件热传递过程的影响, 为后续进一步优化 GAAFET 的结构设计、增强其热稳定性和工作性能提升提供了重要的理论支持和方向指导.

## 4.2 展望

在 GAAFET 和 FinFET 等先进半导体器件的设计中, 电学行为与热特性的紧密联系是不可忽视的. 器件运行时产生的热量及其在材料中的传递直接影响到性能表现和耐用性. 为了精确地模拟和预测器件的实际热行为, 采用电热耦合模型至关重要<sup>[41]</sup>. 这一模型融合了电学和热学分析, 为研究者提供了一个统一框架, 从而能够准确评估电流在器件内部的热效应及其对性能的影响.

在实际应用中, 多栅指结构的器件因其优异的电学控制和快速开关特性而被广泛采用, 但这也使得热分析变得更加复杂. 区别于中部的大部分栅指结构, 两端的栅指结构不再满足周期性热边界条件, 此时, 端部栅指与紧邻栅指的热相互作用都需要被仔细考虑, 以确保整个器件具有稳定的工作性能<sup>[42]</sup>. 此外, 为了实现基本的逻辑判断及信号处理功能, 常需要通过多器件/堆叠器件完成, 针对此类功能电路级的热分析往往需要极大的计量需求, 为了提高热分析的计算效率和精确度, 选择合适的计算方法和坐标系进行模拟至关重要. 通过为特定器件结构定制计算模型, 可以显著降低计算成本, 同时确保分析结果的准确性, 这对于加速器件设计流程和促进技术迭代具有重要意义.

## 参考文献

[1] Liu S Q, Li Q H, Yang C, Yang J, Xu L, Xu L Q, Ma J C, Li Y, Fang S B, Wu B C, Dong J C, Yang J B, Lu J *2022 Phys. Rev. Appl.* **18** 054089

[2] Yoon J S, Rim T, Kim J, Meyyappan M, Baek C K, Jeong Y H *2014 Appl. Phys. Lett.* **105** 102105

[3] Zhang Q Z, Yin H X, Meng L K, Yao J X, Li J J, Wang G L,

Li Y D, Wu Z H, Xiong W J, Yang H, Tu H L, Li J F, Zhao C, Wang W W, Ye T C *2018 IEEE Electron Device Lett.* **39** 464

[4] Belkhiria M, Echouchene F, Jaba N, Bajahzar A, Belmabrouk H *2021 IEEE Trans. Electron Devices* **68** 954

[5] Belkhiria M, Alyousef H A, Chehimi H, Aouaini F, Echouchene F *2022 Thin Solid Films* **758** 139423

[6] Rezgui H, Mukherjee C, Wang Y, Deng M, Kumar A, Müller J, Larrieu G, Maneux C *2023 IEEE Trans. Electron Devices* **70** 6505

[7] Myeong I, Son D, Kim H, Shin H *2019 IEEE Trans. Electron Devices* **66** 4631

[8] Chhabria V A, Sapatnekar S S *2019 20th International Symposium on Quality Electronic Design (ISQED)*. pp235–240

[9] Alvarez P T *2018 Thermal Transport in Semiconductors: First Principles and Phonon Hydrodynamics* (1st Ed.) (Switzerland: Springer) pp41–71

[10] Yang N, Zhang G, Li B W *2010 Nano Today* **5** 85

[11] Guo Y Y, Wang M R *2016 J. Comput. Phys.* **315** 1

[12] Ran X, Guo Y Y, Wang M R *2018 Int. J. Heat Mass Transfer* **123** 616

[13] Zhang C, Guo Z L *2021 Int. J. Heat Mass Transfer* **181** 121847

[14] Cattaneo C *1948 Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena* **3** 83

[15] Vernotte P *1958 Comptes Rendus* **246** 3154

[16] Tzou D Y *1995 J. Heat Transfer* **117** 8

[17] Xu M T, Wang L Q *2005 Int. J. Heat Mass Transfer* **48** 5616

[18] Chen G *2002 J. Heat Transfer* **124** 320

[19] Cao B Y, Guo Z Y *2007 J. Appl. Phys.* **102** 053503

[20] Dong Y, Cao B Y, Guo Z Y *2011 J. Appl. Phys.* **110** 063504

[21] Guyer R A, Krumhansl J A *1966 Phys. Rev.* **148** 766

[22] Guyer R A, Krumhansl J A *1966 Phys. Rev.* **148** 778

[23] Alvarez F X, Jou D, Sellitto A *2009 J. Appl. Phys.* **105** 014317

[24] Hua Y C, Cao B Y *2014 Int. J. Heat Mass Transfer* **78** 755

[25] Kaiser J, Feng T L, Maassen J, Wang X F, Ruan X L, Lundstrom M *2017 J. Appl. Phys.* **121** 044302

[26] Guo Y Y, Wang M R *2018 Phys. Rev. B* **97** 035421

[27] Beardo A, Hennessy M G, Sendra L, Camacho J, Myers T G, Bafaluy J, Alvarez F X *2020 Phys. Rev. B* **101** 075303

[28] Rezgui H, Nasri F, Ali A B H, Guizani A A *2020 IEEE Trans. Electron Devices* **68** 10

[29] Rezgui H, Nasri F, Ali A B H, Guizani A A *2021 Therm. Sci. Eng. Prog.* **25** 100938

[30] Chen G *2005 Nanoscale Energy Transport and Conversion: a Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (New York: Oxford University Press) pp227–275

[31] Peierls R E *1996 Quantum Theory of Solids* (Oxford: Clarendon Press) pp45–52

[32] Chen N X, Sun B H *2017 Chin. Phys. Lett.* **34** 020502

[33] Aissa M F B, Nasri F, Belmabrouk H *2017 IEEE Trans. Electron Devices* **64** 5236

[34] Sellitto A, Carlomagno I, Jou D *2015 Proc. R. Soc. A* **471** 20150376

[35] Beardo A, Calvo-Schwarzwalder M, Camacho J, Myers T, Torres P, Sendra L, Alvarez F, Bafaluy J *2019 Phys. Rev. Appl.* **11** 034003

[36] Zhang Z M *2020 Nano/microscale Heat Transfer* (2nd Ed.) (Switzerland: Springer) p235

[37] Mahajan S S, Subbarayan G, Sammakia B G *2011 IEEE Trans. Compon. Packag. Manuf. Technol.* **1** 1132

[38] Chen G F, Hu B Y, Jiang Z L, Wang Z L, Tang D W *2023 Int. J. Heat Mass Transfer* **202** 123676

- [39] Lai J H, Su Y L, Bu J H, Li B H, Li B, Zhang G H 2020 *IEEE Trans. Electron Devices* **67** 4060
- [40] The Chinese Academy of Sciences 2022 *Thermal Management of Electronic Devices* p2 (in Chinese) [中国科学院 2022 电子设备热管理 (北京: 科学出版社) 第 2 页]
- [41] Cheng Z 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 236502 (in Chinese) [程哲 2021 物理学报 **70** 236502]
- [42] Jeong J, Choi S J, Shim J, Kim E, Kim S K, Kim B H, Kim J P, Suh Y, Beak W J, Geum D, Koh Y, Kim D, Kim S 2023 *2023 International Electron Devices Meeting (IEDM)* pp1–4

## Analysis of GAAFET's transient heat transport process based on phonon hydrodynamic equations\*

Liu Zhe<sup>1)2)</sup> Wei Hao<sup>1)</sup> Cui Hai-Hang<sup>1)</sup> Sun Kai<sup>3)†</sup> Sun Bo-Hua<sup>2)4)‡</sup>

1) (School of Building Services Science and Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

2) (Institute of Mechanics and Technology, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

3) (Institute of Microelectronics of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

4) (Beijing Institute of Nanoenergy and Nanosystems, Chinese Academy of Sciences, Beijing 101400, China)

( Received 9 April 2024; revised manuscript received 28 May 2024 )

### Abstract

Compared to the classical Fourier's law, the phonon hydrodynamic model has demonstrated significant advantages in describing ultrafast phonon heat transport at the nanoscale. The gate-all-around field-effect transistor (GAAFET) greatly optimizes its electrical performance through its three-dimensional channel design, but its nanoscale characteristics also lead to challenges such as self-heating and localized overheating. Therefore, it is of great significance to study the internal heat transport mechanism of GAAFET devices to obtain the thermal process and heat distribution characteristics. Based on this, this paper conducts theoretical and numerical simulation analyses on the phonon heat transfer characteristics within nanoscale GAAFET devices. Firstly, based on the phonon Boltzmann equation, the phonon hydrodynamic model and boundary conditions are rigorously derived, establishing a numerical solution method based on finite elements. For the novel GAAFET devices, the effects of factors such as surface roughness, channel length, channel radius, gate dielectric, and interface thermal resistance on their heat transfer characteristics are analyzed. The research results indicate that the larger the surface roughness, the smaller the channel length and the channel radius, the larger the interface thermal resistance leads to the higher hot spot peak temperature. The non-Fourier heat analysis method based on the phonon hydrodynamic model and temperature jump condition within the continuous medium framework constructed in this paper can accurately predict the non-Fourier phonon heat conduction process inside GAAFET and reveal the mechanisms of resistive scattering and phonon/interface scattering. This work provides important theoretical support for further optimizing the thermal reliability design of GAAFET, improving its thermal stability, and operational performance.

**Keywords:** gate-all-around field-effect transistor, phonon hydrodynamic model, temperature jump, non-Fourier thermal analysis

**PACS:** 44.10.+i, 65.80.-g, 63.20.kg, 63.22.-m

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240491

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62374173) and the Excellent Doctoral Dissertation Cultivation Fund of Xi'an University of Architecture and Technology, China (Grant No. 2023XYBPY006).

† Corresponding author. E-mail: [sunkai@ime.ac.cn](mailto:sunkai@ime.ac.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [sunbohua@binn.cas.cn](mailto:sunbohua@binn.cas.cn)

基于声子水动力学方程分析全环绕栅极晶体管的瞬态热输运过程

刘哲 魏浩 崔海航 孙锴 孙博华

**Analysis of GAAFET's transient heat transport process based on phonon hydrodynamic equations**

Liu Zhe Wei Hao Cui Hai-Hang Sun Kai Sun Bo-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 144401 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240491

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240491>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

纳米线环栅隧穿场效应晶体管的电容模型

Capacitance model for nanowire gate-all-around tunneling field-effect-transistors

物理学报. 2021, 70(21): 218501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211128>

Au-TiO<sub>2</sub>光电极界面声子热输运特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal transport properties of phonons at interface of Au-TiO<sub>2</sub> photoelectrode

物理学报. 2024, 73(10): 103105 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240026>

AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>高电子迁移率晶体管的栅极电容模型

Gate capacitance model of AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> high electron mobility transistor

物理学报. 2021, 70(21): 217301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210700>

纳米尺度金属-氧化物半导体场效应晶体管沟道热噪声模型

A channel thermal noise model of nanoscaled metal-oxide-semiconductor field-effect transistor

物理学报. 2020, 69(5): 057101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191512>

金刚石/碳纳米管异质界面热导及声子热输运特性

Interface thermal conductance and phonon thermal transport characteristics of diamond/carbon nanotube interface

物理学报. 2024, 73(13): 138102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240323>

功率金属-氧化物半导体场效应晶体管静电放电栅源电容解析模型的建立

Establishment of analytical model for electrostatic discharge gate-to-source capacitance of power metal-oxide-semiconductor field-effect transistor

物理学报. 2024, 73(11): 118501 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240144>