

1 ТГц при значениях химического потенциала около 0,1 эВ. Рост химического потенциала графена и частоты ЭМИ ведет к потере усиления за счет плазмонов. Максимальные значения коэффициента распространения и, соответственно, отрицательного значения коэффициента поглощения достигаются при частоте 1 ТГц, индукции магнитного поля 10 Т, химическом потенциале графена 0,1 эВ, что способствует усилению ЭМИ за счет плазмонов.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Plasmonics of coupled graphene micro-structures./ Yan H. [et al.] // New Journal of Physics. – 2012. – V. 14. – №. 12. – P. 125001.
2. Andryieuski, A. Graphene metamaterials based tunable terahertz absorber: effective surface conductivity approach / A. Andryieuski, A. V. Lavrinenko // Optics express. – 2013. – V. 21. – №. 7. – P. 9144–9155.
3. Dubinov, A. A. Terahertz surface plasmons in optically pumped graphene structures / A. A. Dubinov, V. Mitin, T. Otsuji // J. Phys.: Condens. Matter. – 2011. – Vol. 23, No. 14. – P. 145302.
4. Плазмонные эффекты в графеновой наноструктуре / А. В. Фельшерук // Физика конденсированного состояния : материалы XXVI междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистрантов и студентов (Гродно, 19 апр. 2018 г.) / ГрГУ им. Я. Купалы, физ.-техн. фак. — Гродно: ГрГУ, 2018.— С. 142–144.

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ <011>-ОРИЕНТИРОВАННЫХ НАНОШНУРОВ Si/Ge СО СТРУКТУРАМИ ТИПА ЯДРО-ОБОЛОЧКА И СЕГМЕНТНОГО ТИПА

И. И. Холяво<sup>1</sup>, А. Л. Хомец<sup>1</sup>, И. В. Сафронов<sup>2</sup>, Д. Б. Мигас<sup>1</sup>

---

<sup>1)</sup> *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
ул. Петруся Бровки, 6, 220089 Минск, Беларусь  
e-mail: kholyavo.ivan@gmail.com, e-mail: migas@bsuir.by*

<sup>2)</sup> *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,  
e-mail: safronov@bsu.by*

В работе проведено исследование влияния границы раздела нанощнуров Si и Ge с ориентацией <011> и диаметром около 5 нм на их теплопроводность с помощью метода неравновесной молекулярной динамики, реализованного в пакете LAMMPS. Обнаружено, что для нанощнуров Si-ядро/Ge-оболочка возможно достичь коэффициента теплопроводности менее 10 Вт/(м·К), и для нанощнуров сегментного типа 2 Вт/(м·К), в то время как значения теплопроводности для нанощнуров из чистого Si и Ge составляют соответственно 19,1 и 11,4 Вт/(м·К). Учет эффекта перемешивания атомов на границе раздела приводит к снижению теплопроводности.

**Ключевые слова:** нанощнур; кремний; германий; граница раздела; теплопроводность.

# STUDY OF THE INTERFACE INFLUENCE ON THERMAL CONDUCTIVITY OF <011>-ORIENTED Si / Ge NANOWIRES WITH CORE-SHELL AND SEGMENT STRUCTURES

I. I. Khaliava<sup>1</sup>, A. L. Khomets<sup>1</sup>, I. V. Safronov<sup>2</sup> and D. B. Migas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Browki 6, 220013 Minsk, Belarus

<sup>2</sup>Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus

Corresponding author: D. B. Migas (migas@bsuir.by)

In this paper we studied the effect of the interfaces influence on thermal conductivity of <011>-oriented Si and Ge nanowires with diameters of about 5 nm using nonequilibrium molecular dynamics, implemented in the LAMMPS package. It was found that for Si-core / Ge-shell nanowires a thermal conductivity coefficient can be less than 10 W/(m·K), while for segment-type nanowires 2 W/(m·K) was found to compared with 19.1 and 11.4 W/(m·K) for bare Si and Ge nanowires, respectively. Calculations also show that intermixing at the interface leads to a decrease in thermal conductivity.

**Key words:** nanowire; silicon; germanium; interface; thermal conductivity.

## ВВЕДЕНИЕ

Тепло непрерывно теряется в окружающую среду в виде тепловой энергии из-за ограниченной эффективности (30%–40%) тепловых двигателей. Термоэлектрический эффект обеспечивает возможность преобразования этой потерянной тепловой энергии в полезную электрическую энергию, что может привести к экономии топлива и сокращению выбросов парниковых газов. Термоэлектрические генераторы являются компактными, прочными, бесшумными и надежными, поскольку не содержат движущихся частей. Современные применения термоэлектрических генераторов ограничены, потому что эффективность термоэлектрических материалов все еще довольно низкая [1].

Термоэлектрическая добротность непосредственно связана с эффективностью КПД термоэлектрического преобразователя, поэтому это очень удобный параметр для сравнения потенциальной эффективности преобразователей, использующих различные материалы. Эффективность термоэлектрического преобразования определяется величиной:

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa}, \quad (1)$$

$Z$  – термоэлектрическая добротность,  $\sigma$  – электропроводность материала,  $S$  – его термоэдс (коэффициент Зеебека),  $\kappa$  – теплопроводность,  $T$  – рабочая температура или средняя температура  $(T_1 + T_2)/2$  преобразователя,  $T_1$  и  $T_2$  – температуры холодного и горячего контактов соответственно, теплопроводность  $\kappa = \kappa_e + \kappa_L$  есть сумма электронного вклада  $\kappa_e$  и решеточного вклада  $\kappa_L$ .

Из приведенной формулы (1) видно, что высококачественный термоэлектрический материал должен одновременно иметь высокую электропроводность, большую термоэдс и низкую теплопроводность. Термоэдс и проводимость определяются только электронными свойствами материала. Напротив, теплопроводность есть сумма электронного вклада  $\kappa_e$  и решеточного вклада  $\kappa_L$ . Следовательно, чтобы максимально увеличить термоэлектрическую добротность, электронная проводимость должна

быть возможно большей при наименьшей теплопроводности. Однако закон Видемана-Франца показывает, что проводимость связана с электронной теплопроводностью:

$$\frac{\kappa_e}{\sigma} = L_0 T. \quad (2)$$

Здесь  $L_0$  постоянная Лоренца. Увеличение проводимости сопровождается не только ростом электронной теплопроводности, но обычно и падением термоэдс, так что оптимизировать величину  $ZT$  оказывается не просто. Фактор мощности иногда можно увеличить, изменяя концентрацию носителей заряда в материале; в то же время возможности уменьшения  $\kappa_e$  и особенно  $\kappa_L$ , которая определяется структурой, жесткостью, массами атомов и другими характеристиками решетки, в материале определенного типа гораздо более ограничены [2, 3].

В настоящее время все чаще применяются наноструктурированные материалы в термоэлектрических преобразователях, так как в них термоэлектрическая добротность может быть значительно увеличена по сравнению с объемными материалами. Это достигается за счет уменьшения теплопроводности без существенного уменьшения электропроводности. В данной работе рассматривались нанопроволоки из Si и Ge в виде структур типа ядро-оболочка и сегментного типа с экспериментально наблюдаемой ориентацией  $\langle 011 \rangle$  при малых диаметрах, сечением многогранника и диаметром  $\sim 5,2$  нм.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Нанопроволоки из кремния и германия моделировались со структурами типа ядро-оболочка и сегментного типа с резкими границами раздела (ПГР) и с перемешанными границами раздела (ППР). ПГР создавались со структурой упорядоченного  $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$  твердого раствора толщиной в 2 и 4 монослоя. Для всех нанопроволок был выбран поперечный размер  $d$  равный  $\sim 5,2$  нм. Модели нанопроволок вырезались из объемного кристалла (Si, Ge) вдоль направления  $[110]$  с формированием внешних  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  и  $\{111\}$  граней, определяющих наиболее стабильный тип морфологии.

Для получения равновесных структур нанопроволок использовался метод молекулярной статистики, реализованный в программном пакете LAMMPS. Минимизация полной энергии системы осуществлялась с учетом релаксации и оптимизации геометрии атомной структуры с переменной супер-ячейкой. Использовались трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором  $\sim 20$  нм в плоскости поперечного сечения нанопроволок. Межатомное взаимодействие для SiGe системы описывалось с помощью потенциала Терсоффа. Моделирование решеточной теплопроводности для рассматриваемых нанопроволок вдоль их оси проводилось при помощи метода неравновесной молекулярной динамики. Коэффициент теплопроводности  $\kappa_{\langle 110 \rangle}$  определялся из закона Фурье:

$$\kappa_{\langle 110 \rangle} = -\frac{E}{2St(dT/dz)}, \quad (3)$$

где  $E$  – перенесенная тепловая энергия;  $2$  – коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях, вследствие периодических граничных условий;  $t$  – время моделирования;  $S$  – площадь поперечного сечения;  $dT/dz$  – градиент температуры в продольном направлении. Площадь поперечного сечения оцени-

валась через отношение объема нанощура к его высоте. Объем нанощура оценивался в свою очередь через сумму атомных объемов.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для исследуемых Si-Ge ядро-оболочка нанощуров обнаружены две отличающиеся закономерности изменения теплопроводности от соотношения объемного содержания и типа материала ядра-оболочки. В случае структуры Si-ядро/Ge-оболочка (рисунок 1) при увеличении объемного содержания атомов Si наблюдается минимум на зависимости теплопроводности, который лежит ниже значения теплопроводности для нанощура из чистого Ge (11,4 Вт/(м·К)), а в случае структуры Ge-ядро/Si-оболочка (рисунок 2) имеет место понижение значения теплопроводности с 19,1 (для нанощура из чистого Si) до 11,4 Вт/(м·К) (для нанощура из чистого Ge) без четко-выраженного минимума. Учет эффекта перемешивания атомов на границах приводит к дополнительному снижению теплопроводности Si-Ge ядро-оболочка нанощуров (рисунки 1 и 2).

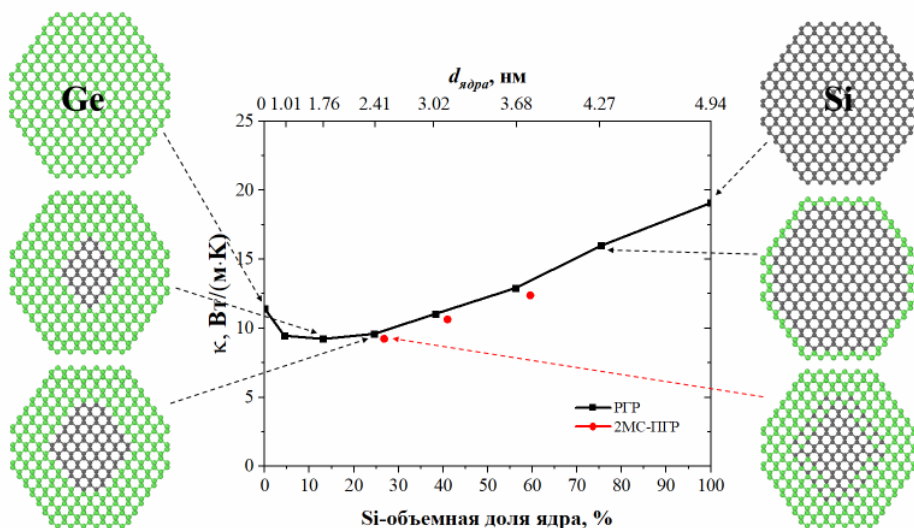


Рисунок 1. – Зависимость теплопроводности от процентного содержания атомов Si в нанощуре

Полученные закономерности можно объяснить несколькими причинами в совокупности [4]: (а) различием коэффициентов теплопроводности для Si и Ge при применении их в качестве материала ядра или оболочки, (б) влиянием рассеяния фононов продольными границами раздела и (в) возникновением когерентного фононного резонанса, свойственным структурам с архитектурой типа ядро-оболочка [5].

В случае с исследуемыми нанощурами с чередующимися Si и Ge сегментами было обнаружено, что при уменьшении периода модуляции до 16 монослоев (4 параметра решетки) в ячейке с обоими типами границ наблюдается снижение значения коэффициента теплопроводности до ~2 Вт/(м·К), а при дальнейшем уменьшении периода модуляции до минимально возможного значения (8 монослоев) имеет место повышение значения коэффициента теплопроводности: до 2,3 Вт/(м·К) для ПГР и до 7,5 Вт/(м·К) для ПГР толщиной 4 монослоя.

Как видно из графика рисунка 3 более тонкие перемешанные границы (2 моно-слоя) практически не оказывают влияние на теплопроводность. Значение коэффициента теплопроводности 7,5 Вт/(м·К) соответствует нанощнур со структурой упорядоченного твердого раствора.

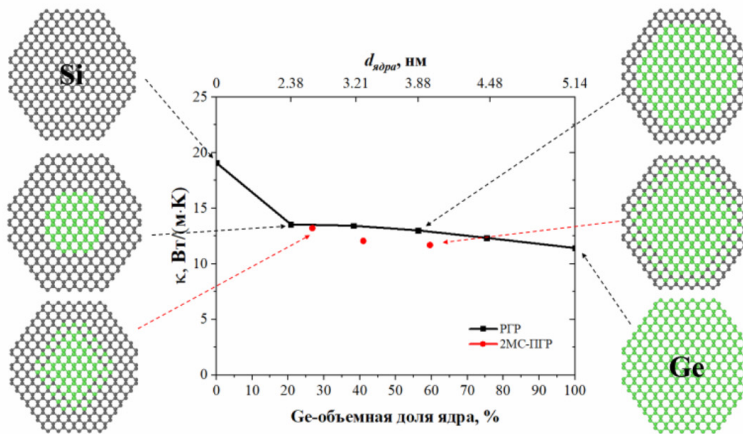


Рисунок 2. – Зависимость теплопроводности от процентного содержания атомов Ge в нанощнуре

Снижение теплопроводности в Si-Ge сегментных нанощнурах с уменьшением периода модуляции обусловлено увеличением скорости фонов-интерфейсного рассеяния [6] для РГР, а для случая ПГР дополнительно рассеянием фононов на дефектах в виде перемешанных атомов [7].

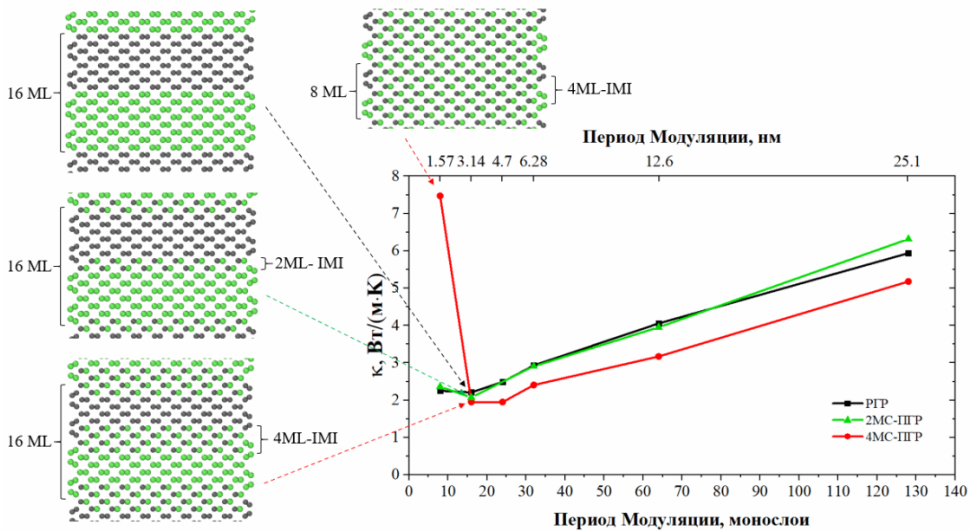


Рисунок 3. – Зависимость теплопроводности от периода модуляции

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследований было установлено, что наименьшим коэффициентом теплопроводности 2 Вт/(м·К) обладают нанощнуры со структурой сегментного типа (16 монослоев) с ППР (4 монослоя). Для нанощнуров со структурой ядро-оболочка минимальное значение теплопроводности (9,2 Вт/(м·К)) наблюдается для структуры Si-ядро/Ge-оболочка с объемным содержанием ядра 13 %, что меньше соответствующих значений теплопроводности для нанощнуров из чистого Si и Ge.

Полученные результаты смогут стать отправной точкой для дальнейшего исследования Si-Ge нанощнуров с чередующимися Si/Ge слоями в ядре. Не исключено, что Si-Ge нанощнуры типа ядро/оболочка для других экспериментально наблюдаемых ориентаций, а именно  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$ , также будут обладать схожей зависимостью теплопроводности от объемной доли материала ядра. В случае чередующихся сегментов Si и Ge вдоль оси таких нанощнуров не исключено еще большее уменьшения коэффициента теплопроводности.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. High performance thermoelectric materials: Progress and their applications / L. Yang [et al.] // *Advanced Energy Materials*. – 2017. – V. 8, № 6. – P. 1701797.
2. Ф. Иоффе. Полупроводниковые термоэлементы / Изд. АН СССР, М. – Л., 1956. – 103 с.
3. Дмитриев, А.В. Современные тенденции развития термоэлектрических материалов / А.В. Дмитриев, И.П. Звягин // *УФН*. – 2010. – Т. 180, № 8. – С. 821–838.
4. Tailoring thermal conductivity of silicon/germanium nanowires utilizing core-shell architecture / S. Sarikurt [et al.] // *J. Appl. Phys.* – 2016. – V. 119, № 15. – P. 155101.
5. Chen, J. Impacts of Atomistic Coating on Thermal Conductivity of Germanium Nanowires / J. Chen, G. Zhang, B. Li // *Nano Lett.* – 2012. – V. 12, № 6. – P. 2826–2832.
6. Hu, M. Si/Ge Superlattice Nanowires with Ultralow Thermal Conductivity / M. Hu, D. Poulidakos // *Nano Lett.* – 2012. – V. 12, № 11. – P. 5487–5495.
7. Rurali, R. Heat transport across a SiGe nanowire axial junction: Interface thermal resistance and thermal rectification / R. Rurali, X. Cartoixa, L. Colombo // *Phys. Rev. B*. – 2014. – V. 90, № 4. – P. 041408.

## ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК Si/Ge

А. Л. Хомец<sup>1</sup>, И. И. Холяво<sup>1</sup>, Д. Б. Мигас<sup>1</sup>, И. В. Сафронов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. Петруся Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь,  
e-mail: infuze193@gmail.com, e-mail: migas@bsuir.by*

<sup>2</sup> *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,  
e-mail: safronov@bsu.by*

В данной работе исследовалось влияние морфологии на решеточную составляющую теплопроводности в тонких пленках на основе Si и Ge с помощью метода неравновесной молекулярной динамики, реализованного в программном пакете LAMMPS. Рассматривались тонкие пленки с (110), (100) и (111) ориентациями и толщинами от 1,08 до 7,5 нм в зависимости от ориентации. Результаты показывают, что при распространении теплового потока вдоль одного направления существенное