

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. Хомец¹, И. И. Холяво¹, Д. Б. Мигас¹, И. В. Сафронов²

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

² *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

влияние на решеточную теплопроводность оказывает кристаллографическая ориентация пленки. При распространении теплового потока вдоль направления [110] коэффициент решеточной составляющей теплопроводности имеет наименьшее значение для пленки с (100) ориентацией и равен 5,1 Вт/м·К.

Ключевые слова: теплопроводность; тонкие пленки; молекулярная динамика; ориентация поверхности

EFFECT OF SURFACE ORIENTATION ON THERMAL CONDUCTIVITY OF Si/Ge THIN FILMS

A. L. Khomets¹, I. I. Kholiyavo¹, D. B. Migas¹, I. V. Safronov²

¹⁾ Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, st. Petrusya Brovki 6, 220013 Minsk, Belarus,

²⁾ Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus,
Corresponding author: D. B. Migas (migas@bsuir.by)

In this paper we present our results obtained by molecular dynamics simulations (the code LAMMPS) how morphology affects lattice thermal conductivity of Si and Ge thin films. (110), (100) and (111) orientations of thin films with thickness of 1.08 to 7.5 nm with respect to the orientation and a number of Si-Ge layers. The results show that when the heat flux propagates along the same direction, the crystallographic orientation of the film has a significant effect on the lattice thermal conductivity. When the heat flux spreads along [110] direction of a film with the (100) orientation, the lattice thermal conductivity has the lowest value of 5.1 W/(m·K).

Key words: thermal conductivity; thin films; molecular dynamics; surface orientation.

ВВЕДЕНИЕ

В современном мире одной из самых главных проблем является получение экологически чистой и возобновляемой энергии. В этой связи большое внимание было обращено на твердотельные термоэлектрические генераторы, которые создаются на основе термоэлектрических материалов. Известно, что около 70 % энергии, вырабатываемой с помощью полезных ископаемых, например на теплостанциях или в автомобилях, рассеивается в виде тепла. Термоэлектрические генераторы способны часть этой потерянной энергии преобразовать в электрическую.

Главная проблема термоэлектрических материалов – низкая эффективность преобразования тепловой энергии в электрическую. КПД таких устройств, в лучшем случае, не превышает 6–7%. Эффективность термоэлектрического преобразования определяется безразмерным коэффициентом термоэлектрической добротности:

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

где σ – электропроводность материала, S – термоэдс (коэффициент Зеебека), κ_l и κ_e – теплопроводность, которая состоит из вкладов электронной и решеточной составляющей, T – рабочая температура.

С середины XX века и до настоящего времени наиболее эффективными термоэлектрическими материалами остаются соединения Te_2Bi_3 и PbTe_2 и их модифика-

ции, предложенные Иоффе [1]. Однако, позже появились новые подходы для увеличения термоэлектрической добротности посредством уменьшения решеточной составляющей теплопроводности [2] при использовании структур пониженной размерности, к которым относятся тонкие пленки или нанопровода. Такое снижение происходит из-за того, что данные наноструктуры могут рассеивать больший спектр фононов, которые участвуют в теплопереносе, что в итоге приводит к снижению теплопроводности материала без существенного снижения его электропроводности.

Целью данной работы является теоретическое исследование (с помощью метода неравновесной молекулярной динамики) решеточной составляющей теплопроводности, обусловленной влиянием различных поверхностей тонких пленок.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В данной работе рассматривались симметричные однопериодические Si/Ge пленки с (110), (100) и (111) ориентациями. Толщина индивидуальных Si и Ge слоев в пленках варьировалась от 4 до 16 и от 6 до 24 моноатомных слоев для (100), (110) и (111) ориентаций, соответственно. Тонкие пленки создавались с помощью программы для визуализации и анализа данных OVITO [3].

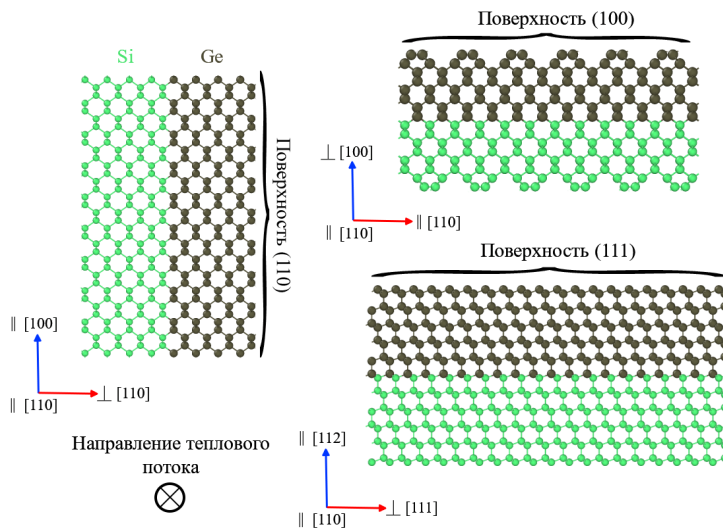


Рисунок 1. – Si/Ge пленки с разными поверхностями

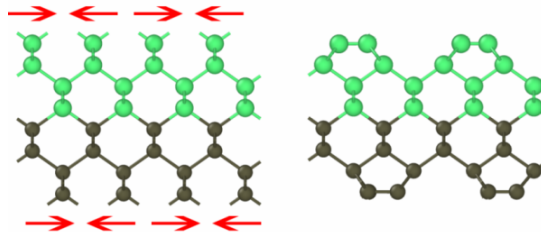


Рисунок 2. – Реконструкция поверхности для ориентации {100}

Для ориентаций (100) и (111) каждый атом на поверхности имеет только одну оборванную связь, и использовались, соответственно, стандартные $p(1 \times 1)$ и $p(2 \times 1)$ реконструкции поверхности. Для (100) ориентации проводилась димеризация атомов на поверхности. С помощью программы JMol [4] была произведена реконструкция поверхности для данной ориентации путем смещения определенных атомов навстречу друг другу, чтобы была образована связь между ними (рисунок 2).

Решеточная теплопроводность моделировалась с помощью программного пакета LAMMPS [5] методом неравновесной молекулярной динамики. Необходимо отметить, что при моделировании методом неравновесной молекулярной динамики коэффициент теплопроводности становится зависимым от размера супер-ячейки вдоль распространения теплового потока, когда имеется ее соразмерность со средней длиной свободного пробега фононов при данной температуре [6]. В связи с этим длина супер-ячейки вдоль распространения теплового потока задавалась равной около 100 нм.

Моделирование проводилось вдоль направления $\langle 110 \rangle$ для всех трех ориентаций. Коэффициенты решеточной составляющей теплопроводности определялись из закона Фурье:

$$\kappa = -\frac{E}{2St \left(\frac{dT}{dx} \right)} \quad (1)$$

где E – количество тепловой энергии; t – время моделирования; S – площадь поперечного сечения пленки; $\frac{dT}{dx}$ – градиент температуры в направлении распространения теплового потока.

Временной шаг задавался равным 1 фс. Первоначально системы приводились в равновесие с помощью изобарно-изотермического (NPT) и канонического (NVT) ансамблей в течение 0,1 нс каждый при температуре 300 К. Вторым этапом установления равновесия проводился с помощью микроканонического ансамбля (NVE) в течение 1 нс. На последнем этапе для создания градиента температуры в тонких пленках устанавливалось два термостата Ланжевена: холодный термостат имел температуру 290К, горячий – 300 К.

При моделировании также были использованы трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором в 20 \AA между соседними пленками для минимизации взаимодействия между ними. Межатомное взаимодействие для (Si-Ge) системы описывалось с помощью потенциала Терсоффа.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 3 представлены зависимости решеточной теплопроводности от толщины однопериодической Si/Ge пленки для трех поверхностных ориентаций.

Анализируя полученные зависимости можно заметить, что теплопроводность имеет тенденцию к снижению с уменьшением толщины тонких пленок. Также следует отметить, что теплопроводность вдоль одного и того же [110] направления для трех рассматриваемых ориентаций существенно отличается. Установлено, что минимальное значение теплопроводности в $5,1 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ достигается для (100) пленок наименьшей толщины (1,08 нм). Для пленок с ориентациями (111) и (100) наименьшие значения теплопроводности равны $15,4 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ (1,88 нм) и $22,4 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ (1,53 нм)

соответственно. Следует отметить, что отличие в толщине пленок получается вследствие различия размеров элементарных ячеек данных ориентаций.

Снижение продольной теплопроводности с уменьшением толщины Si пленок [7–9, 11], как известно, обусловлено увеличением скорости фонов-поверхностного рассеяния и эффектом фононного конфеймента [8]. В нашем случае дополнительно будет увеличиваться также скорость фонов-интерфейсного рассеяния из-за наличия одной внутренней границы раздела.

Выявленная закономерность влияния поверхностной ориентации на теплопроводность однопериодических Si/Ge пленок подтверждается проведенными ранее исследованиями для тонких Si пленок [9]. Несмотря на одно и то же направление теплового транспорта в рассматриваемых структурах, эффективная групповая скорость фононов и скорость фононного рассеяния в них будут отличаться. Так авторами работы [9] было показано, что график зависимости эффективной групповой скорости фононов от частоты в тонких Si пленках для случая (110)/[110] лежит выше, по сравнению с (100)/[110] и (111)/[110]. Вследствие того, что поверхности постоянной энергии для поперечных акустических колебаний (TA) имеют кубическую форму при любых волновых векторах и, таким образом, скорости фононов в основном направлены вдоль [100], это приводит к очень сильному рассеянию TA-мод для (100) поверхностей. В то время как поверхности постоянной энергии для продольных акустических колебаний (LA) будут анизотропными, т.е. будут воспроизводить форму первой зоны Бриллюэна ГЦК-решетки (шестиугольные {111} и квадратные {100} грани), только при больших значениях волновых векторов, поэтому сильное рассеяние наблюдается преимущественно для (111) поверхностей и незначительное для (100) [10]. Кроме того, отмечается [11], что вероятность зеркального рассеяния фононов от свободных поверхностей в тонких Si пленках достигает 98% для (110) поверхностей и только 78% (более диффузионное) для (100) поверхностей, что также влияет на скорость фонов-поверхностного рассеяния. Приведенные выше факторы объясняют полученные зависимости на рисунке 3.

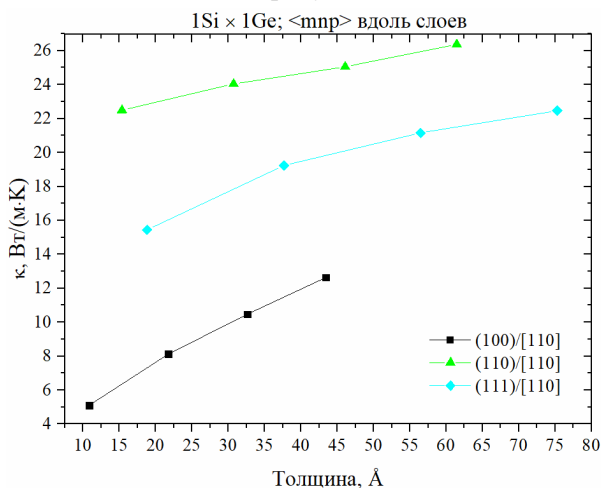


Рисунок 3. – Зависимость коэффициента решеточной теплопроводности от толщины пленки для трех ориентаций

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было осуществлено исследование влияния морфологии на решеточную составляющую теплопроводности тонких пленок Si/Ge. Было установлено, что на коэффициент решеточной составляющей теплопроводности влияют такие параметры, как толщина пленки и ориентация свободной поверхности. Для разных кристаллографических ориентаций теплопроводность отличается в несколько раз. Полученные результаты могут быть использованы при дальнейшем поиске полупроводниковых структур с минимальной решеточной теплопроводностью для термоэлектрических приложений.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Иоффе, Ф. Полупроводниковые термоэлементы / Ф. Иоффе. – Изд. АН СССР, М. – Л., 1956, 103 с.
2. G. A. Slack. New materials and performance limits for thermoelectric cooling / CRC handbook of thermoelectric, Edited by Rowe, D. M. CRC Press, Boca Raton, 1995, pp. 407–440.
3. A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010) 015012. <https://ovito.org>.
4. JMol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. <https://jmol.org>.
5. Steve Plimpton. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / J. of Computational Physics, Volume 117, Issue 1, 1 March 1995, Pages 1–19.
6. Yuping He. Lattice Thermal Conductivity of Semiconducting Bulk Materials: Atomistic Simulations / Yuping He, Ivana Savić, Davide Donadio, Giulia Galli // Phys Chem Chem Phys. 2012 Dec 21;14(47):16209–22.
7. Prediction of the thermal conductivity anisotropy of Si nanofilms. Results of several numerical methods / Damian Terris [et al.] // International Journal of Thermal Sciences. – 2009. – V. 48. – P. – 1467-1476.
8. Xinjiang Wang. Computational Study of In-Plane Phonon Transport in Si Thin Films / Xinjiang Wang, Baoling Huang // Scientific reports. – 4(1):6399 – 2014.
9. Hossein Karamitaheri. Ballistic phonon transport in ultra-thin silicon layers: Effects of confinement and orientation / Hossein Karamitaheri, Neophytos Neophytou, Hans Kosina // Journal of Applied Physics 113, 204305 (2013).
10. Z. Aksamija. Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes / Z. Aksamija, I. Knezevic // Phys. Rev. B 82, 045319. – 2010.
11. P. Heino. Dispersion and thermal resistivity in silicon nanofilms by molecular dynamics / The European Physical Journal B., 60, 171-179, – 2007.

ДИНАМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ ПОТОКОВ НА ОКСИД АЛЮМИНИЯ

**Н. Н. Черенда¹, В. В. Углов¹, В. М. Асташинский², А. М. Кузьмицкий²,
Ж. З. Шерматов³, М. Х. Арипова⁴**

¹⁾ Белорусский государственный университет, пр. Независимости 4, 220030 г. Минск, Республика Беларусь, cherenda@bsu.by, uglov@bsu.by

²⁾ Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки 15, 220072 г. Минск, Республика Беларусь, ast@hmti.ac.by, antey@hmti.ac.by

³⁾ Институт материаловедения НПО «Физика-Солнце» АН РУз, Ташкентская обл., Паркентский р-н, 102226 п. «Солнце», Республика Узбекистан, shermatov-82@bk.ru

⁴⁾ Ташкентский химико-технологический институт, ул. Навоий 32, 100011 г. Ташкент, Республика Узбекистан, aripova1957@yandex.ru