

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Enhanced Hydrogen Evolution Catalysis from Chemically Exfoliated Metallic MoS₂ Nanosheets / M.A. Lukowski [et al.] // J. Am. Chem. Soc. – 2013. – Vol. 135, № 28. – P. 10274–10277.
2. Conducting MoS₂ Nanosheets as Catalysts for Hydrogen Evolution Reaction / D. Voiry [et al.] // Nano Lett. – 2013. – Vol. 13, № 12. – P. 6222–6227.
3. Chang, K. l-Cysteine-Assisted Synthesis of Layered MoS₂/Graphene Composites with Excellent Electrochemical Performances for Lithium Ion Batteries/ K. Chang, W. Chen // ACS Nano. – 2011. – Vol. 5, № 6. – P. 4720–4728.
4. Atomically Thin WS₂ Nanosheets Based Gas Sensor/ D.J. Late [et al.] // Sensor Lett. – 2016. – Vol. 14, № 12. – P. 1249–1254.
5. Vertical MoS₂ transistors with sub-1-nm gate lengths / F. Wu [et al.] // Nature. – 2022. – Vol. 603. – P. 259–264.
6. Identification of few-layer ReS₂ as photo-electro integrated catalyst for hydrogen evolution/ X. Xu [et al.] // Nano Energy. – 2018. – Vol. 48. – P. 337–344.
7. Auto-optimizing Hydrogen Evolution Catalytic Activity of ReS₂ through Intrinsic Charge Engineering / Y. Zhou [et al.] // ACS Nano. – 2018. – Vol. 12, № 5 – P. 4486–4493.
8. Vertically Oriented Arrays of ReS₂ Nanosheets for Electrochemical Energy Storage and Electrocatalysis / Y. Zhou [et al.] // Nano Lett. – 2016. – Vol. 16, № 6. – P. 3780–3787.
9. Highly Sensitive Detection of Polarized Light Using Anisotropic 2D ReS₂ / F. Liu [et al.] // Adv. Funct. Mater. – 2016. – Vol. 26. – P. 1169–1177.
10. Field Effect Transistors with Current Saturation and Voltage Gain in Ultrathin ReS₂ / C.M. Corbet [et al.] // ACS Nano. – 2015. – Vol. 9, №1 – P. 363–370.
11. High Responsivity Phototransistors Based on Few Layer ReS₂ for Weak Signal Detection / F. Liu [et al.] // Adv. Funct. Mater. – 2016. – Vol. 26. – P. 1938–1944.
12. Baglov, A.V. Crystal Structure and Electronic Properties of the Rhenium Disulfide / A.V. Baglov, L.S. Khoroshko // Zhurnal Prikladnoi Spektroskopii. – 2022. – Vol. 89, № 5. – P. 651–656.
13. Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 67, № 15. – P. 155108 (1–5).
14. Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69, № 19. – P. 195113 (1–19).
15. Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72, № 4. – P. 045121 (1–8).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ ЭЛЕКТРОНИКИ

В. И. Белько

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4,
220030 Минск, Беларусь, e-mail: belko@bsu.by*

Выполнен молекулярно-динамический расчет коэффициента теплопроводности в сплошном кремнии и в тонких кремниевых слоях с использованием неравновесного прямого метода. Для случая тонкого слоя проведен расчет коэффициента теплопроводности в продольном и в поперечном направлениях. Коэффициенты теплопроводности в тонком слое в поперечном направлении оказались несколько выше, чем коэффициенты в продольном направлении.

Ключевые слова: теплопроводность; наноструктура; молекулярная динамика; электроника.

MODELING OF HEAT TRANSFER IN NANOSIZED STRUCTURES OF ELECTRONICS

V. I. Belko

Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus

Corresponding author: V. I. Belko (belko@bsu.by)

A molecular-dynamic calculations of the thermal conductivity coefficient in bulk silicon and in thin silicon layers were performed using the nonequilibrium direct method. For the case of a thin layer, the thermal conductivity coefficient was calculated in the longitudinal and transverse directions. The thermal conductivity coefficients in a thin layer in the transverse direction turned out to be slightly higher than the coefficients in the longitudinal direction.

Key words: thermal conductivity; nanostructure; molecular dynamics; electronics.

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование технологических процессов производства полупроводниковых устройств стало важной составляющей частью современной индустрии. В настоящее время имеет место переход к наноразмерным элементам в микроэлектронике. При этом чрезвычайно высокая плотность тока, а также высокая степень компоновки электронных устройств приводят к целому ряду проблем, например, существенному нагреванию отдельных устройств и целых интегральных схем. Проблема высокой температуры в интегральных схемах становится одной из важнейших для наноразмерной электроники и будет еще более важной в связи с внедрением новых трехмерных схем. Традиционные методы, используемые для моделирования теплового переноса тепла в твердотельных объектах, неприменимы в случае наноразмерных структур. Это объясняется следующими факторами: эффективная теплопроводность тонких полупроводниковых слоев намного ниже, чем у объемного материала; если сильные локализованные электрические токи приводят к разогреву в малой области устройства размером несколько десятков нанометров, то на границе этой области возникает скачок температуры; тепловое контактное сопротивление на границах раздела материалов.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Метод молекулярной динамики хорошо подходит для моделирования тепловых эффектов в наноразмерных структурах. Имеются три основных метода вычисления параметров теплопроводности с использованием молекулярно-динамического моделирования [1] (i) равновесный подход, основанный на методе Green-Kubo; (ii) неравновесный прямой метод, основанный на порождении температурного градиента с помощью источника и стока тепла; (iii) гомогенный неравновесный прямой метод, в котором индуцируется поток тепла без формирования температурного градиента; при этом можно использовать периодические граничные условия подобно равновесному подходу. В данной работе выполнен молекулярно-динамический расчет параметров теплопроводности в кремниевых наноструктурах с использованием неравновесного прямого метода.

Рассмотрим образец модельного кристалла кремния в виде прямоугольного параллелепипеда. Для данной задачи параллелепипед должен быть вытянут в направлении оси x , вдоль одного из направлений будет искусственно формироваться температурный градиент следующим образом. В области параллелепипеда, прилегающей к одной границе по данному направлению, генерируем входящий тепловой поток (увеличивая скорости частиц в соответствии с требуемой величиной потока), а на противоположной границе параллелепипеда аналогичным образом, замедляя скорости движения частиц, порождаем сток тепла. Модельный кристалл предварительно должен быть приведен в равновесие при заданной температуре (что достигается после порядка 10^6 временных шагов молекулярной динамики). После относительно долгого основного этапа моделирования с фиксированными потоками тепла в образце формируется температурный градиент. В результате можно оценить коэффициент теплопроводности на основании закона Фурье, используя линейную часть температурной зависимости от переменной, вдоль которой сформирован поток тепла.

В данной работе для расчетов использовался комплекс программ с открытым кодом LAMMPS, реализующий метод молекулярной динамики. Пакет LAMMPS позволяет использовать ускорение расчетов за счет параллельного выполнения на многопроцессорных системах путем пространственной декомпозиции. При этом управляющие команды позволяют задать входящий и выходящий тепловые потоки без модификации кода. Однако выбрать параметры моделирования так, чтобы получить температурный градиент и не разрушить при этом динамику системы, достаточно сложно.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты, полученные для модельного образца кристалла кремния с периодическими граничными условиями по всем трем направлениям при температуре 300 K и различных комбинаций размера образца, представлены в табл. 1. Размер образца в табл. 1-3 указан в элементарных ячейках, а величина элементарной ячейки составляет 0.543 нм. В случае полностью периодических граничных условий мы имеем дело с моделированием сплошного (bulk) кремния, но полученные значения коэффициента теплопроводности не имеет смысла сравнивать напрямую с известным экспериментальным значением ~ 120 Вт/(м·K), так как размер расчетной области для этого слишком мал. В то же время, результаты находятся в разумном соответствии с опубликованными расчетами [2, 3], проведенными аналогичным образом и представленными в правой части табл. 1.

Таблица 1

Рассчитанные значения коэффициента теплопроводности с полностью периодическими граничными условиями

Размер образца, элементарных ячеек	Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·K)	Размер образца в работах [2, 3], элементарных ячеек	Коэффициент теплопроводности в работах [2, 3], Вт/(м·K)
20×4×4	2	20×2×2	3
50×4×4	11	50×2×2	10
140×3×3	35	144×3×3	29

Результаты, полученные для модельного образца кристалла кремния с периодическими граничными условиями по направлениям y , z и свободными поверхностями по

переменной x при температуре 300 К и различных комбинаций размера образца, представлены в табл. 2; жирным шрифтом выделено количество ячеек для направления со свободными поверхностями. В этом случае мы имеем дело с переносом тепла в тонком слое в направлении, перпендикулярном к его поверхностям. При выполнении анализа результатов расчетов наблюдались трудности при нахождении линейной части графика зависимости температуры от координаты x , вдоль которой формируется поток тепла. В результате неопределенность значений найденного коэффициента теплопроводности составляет 30 %. Отметим, что найденные значения коэффициента теплопроводности оказались в 1.5–2 раза больше, чем полученные в работе [4], где использовался равновесный метод Green-Kubo.

Результаты, полученные для модельного образца кристалла кремния с периодическими граничными условиями по направлениям x , z и свободными поверхностями по y при температуре 300 К и различных комбинаций размера образца, представлены в табл. 3. Как и для табл. 2, жирным шрифтом выделено количество ячеек для направления со свободными поверхностями. В этом случае мы имеем дело с переносом тепла в тонком слое вдоль поверхности. В этом случае также наблюдались трудности при нахождении линейной части графика зависимости температуры от координаты x , вдоль которой формируется поток тепла; неопределенность значений найденного коэффициента теплопроводности составляет 20 %. Найденные значения коэффициента теплопроводности оказались в 1.5 раза меньше, чем полученные в работе [4].

Таблица 2

**Рассчитанные значения
поперечной составляющей
коэффициента теплопроводности
в тонком слое кремния**

Размер образца, элементарных ячеек	Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К)
10×6×6	13.5
20×4×4	21
50×8×8	30
140×3×3	68

Таблица 3

**Рассчитанные значения
продольной составляющей
коэффициента теплопроводности
в тонком слое кремния**

Размер образца, элементарных ячеек	Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К)
40×10×3	6.8
60×10×3	9.2
80×10×3	10.5
40×20×8	20.5

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнен молекулярно-динамический расчет коэффициента теплопроводности в сплошном кремнии и в тонких кремниевых слоях с использованием неравновесного прямого метода. Для случая тонкого слоя проведен расчет коэффициента теплопроводности в продольном и в поперечном направлениях. Полученные результаты для сплошного кремния хорошо согласуются с данными других авторов, полученными таким же методом, а также с помощью равновесного метода Green-Kubo.

При вычислении коэффициента теплопроводности в тонком слое в продольном и в поперечном направлениях наблюдались трудности при нахождении линейной части зависимости температуры от координаты, вдоль которой формируется поток тепла. В результате неопределенность значений найденного коэффициента теплопроводности составляет 20–30 %. Коэффициенты теплопроводности в тонком слое в по-

перечном направлении несколько выше, чем коэффициенты в продольном направлении, параллельно поверхностям слоя.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Termentzidis, K. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of the in-plane thermal conductivity of superlattices with rough interfaces / K. Termentzidis, P. Chantrenne, P. Keblinski // *Physical Review*. 2009. — Vol.79B. — P.214307.
2. Srinivasan, S. On Parallel Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations of Heat Conduction in Heterogeneous Materials with Three Body Potentials: Si/Ge Superlattice / S. Srinivasan, R.S. Miller // *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*.— 2007. — Vol.52. — P.297-321.
3. Schelling, P. K. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity / P.K. Schelling, S.R. Phillpot, P. Keblinski // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65.— P. 14–17.
4. In plane and out of plane thermal conductivity of Si thin films predicted by molecular dynamics / C. Gomes [et al.] // *J. Heat Transfer*. — 2006. — Vol.128. — P.1114–1121.

МОРФОЛОГИЯ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Cr-TiN ПОКРЫТИЙ ОСАЖДЕННЫХ, ПРИ РАЗЛИЧНОМ ДАВЛЕНИИ АЗОТА

А. Г. Бердиев¹, Н. Н. Федосенко¹, Е. А. Кулеш¹, В. А. Емельянов²

¹) УО «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины»,
ул. Советская 102, 246003, Гомель, Беларусь,
e-mail: katrinamillers29@mail.ru; fedosenko@gsu.by

²) НПО «Интеграл», ул. Казинца И.П., 121А, 220108, Минск, Беларусь

В работе установлены особенности формирования поверхностной морфологии композиционных покрытий на основе нитрида титана, легированного хромом, а также определена их твердость и модуль упругости в зависимости от расхода рабочих газов. Методами атомно-силовой и электронной микроскопии показано изменение параметров поверхностной морфологии (шероховатости RMS, размера зерна) покрытий в зависимости от состава рабочей газовой смеси. Полученные результаты определяются особенностями осаждения и роста покрытий, а также протеканием процессов химического взаимодействия между элементами в покрытии.

Ключевые слова: композиционные покрытия; нитрид титана; хром; морфология; твердость; модуль упругости.

MORPHOLOGY AND MECHANICAL PROPERTIES OF Cr-TiN COATINGS DEPOSITED AT DIFFERENT NITROGEN PRESSURES

A. G. Berdiev¹, N. N. Fedosenko¹, E. A. Kulesh¹, V. A. Emelyanov²

¹) EI "Francysk Skorina Gomel State University", st. Sovetskaya 102, 246003, Gomel, Belarus,
²) RPA "Integral", st. Kazintsa I.P., 121A, 220108, Minsk, Belarus
Corresponding author: E. A. Kulesh (katrinamillers29@mail.ru)

The paper establishes the features of the formation of the surface morphology of composite coatings based on titanium nitride alloyed with chromium and determines their hardness and modulus of elasticity depending on the consumption of working gases.