

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ <011>-ОРИЕНТИРОВАННЫХ НАНОШНУРОВ Si/Ge СО СТРУКТУРАМИ ТИПА ЯДРО-ОБОЛОЧКА И СЕГМЕНТНОГО ТИПА

Холяво И.И., Хомец А.Л., Сафронов И.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Мигас Д.Б. – д-р физ.-мат. наук, доцент

В работе проведено исследование влияния морфологии нанощнуров Si и Ge с ориентацией <011> и диаметром около 5 нм на их теплопроводность. 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 19,1 и 11,4 Вт/(м·К).

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 нанощнуры из Si и Ge в виде структур типа ядро-оболочка и сегментного типа с экспериментально наблюдаемой ориентацией <011> при малых диаметрах, сечением многогранника и диаметром ~ 5,2 нм.

Моделирование решеточной теплопроводности для рассматриваемых нанощнуров вдоль их оси проводилось с помощью пакета LAMMPS, применяя метод неравновесной молекулярной динамики. Коэффициент теплопроводности определялся из закона Фурье. Межатомное взаимодействие для атомов кремния и германия описывалось с помощью потенциала Терсоффа.

Для исследуемых Si/Ge ядро-оболочка нанощнуров обнаружены две отличающиеся закономерности изменения теплопроводности от соотношения объемного содержания типа материала ядра и 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 нанощнура 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 нанощнура из чистого Si) до 11,4 Вт/(м·К) (для нанощнура из чистого Ge) без четко-выраженного минимума.

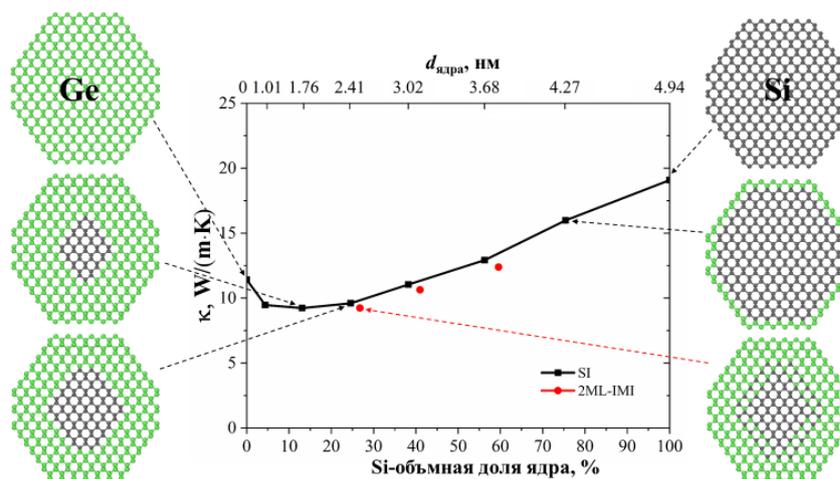


Рисунок 1 – Зависимость теплопроводности от процентного содержания атомов Si в нанощнуре

В случае с исследуемыми нанощнурами с чередующимися Si/Ge сегментами было обнаружено, что при уменьшении периода модуляции до 16 монослоев (4 параметра решетки) в Si/Ge 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) в случае резких границ и до 7,5 Вт/(м·К) в случае перемешанных границ толщиной 4 монослоя. Как видно из графика рисунка 3 более тонкие перемешанные границы (2 монослоя) практически не оказывают влияние на теплопроводность. Значение коэффициента теплопроводности 7,5 Вт/(м·К) соответствует нанощнуру со структурой упорядоченного твердого раствора.

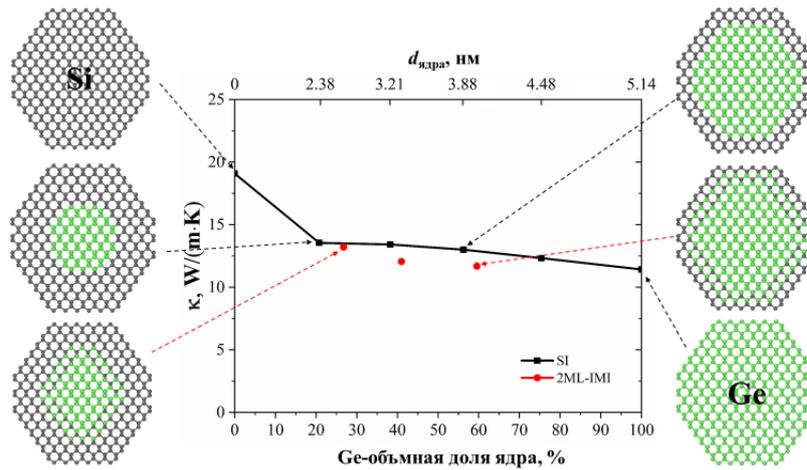


Рисунок 2 – Зависимость теплопроводности от процентного содержания атомов Ge в нанопрове

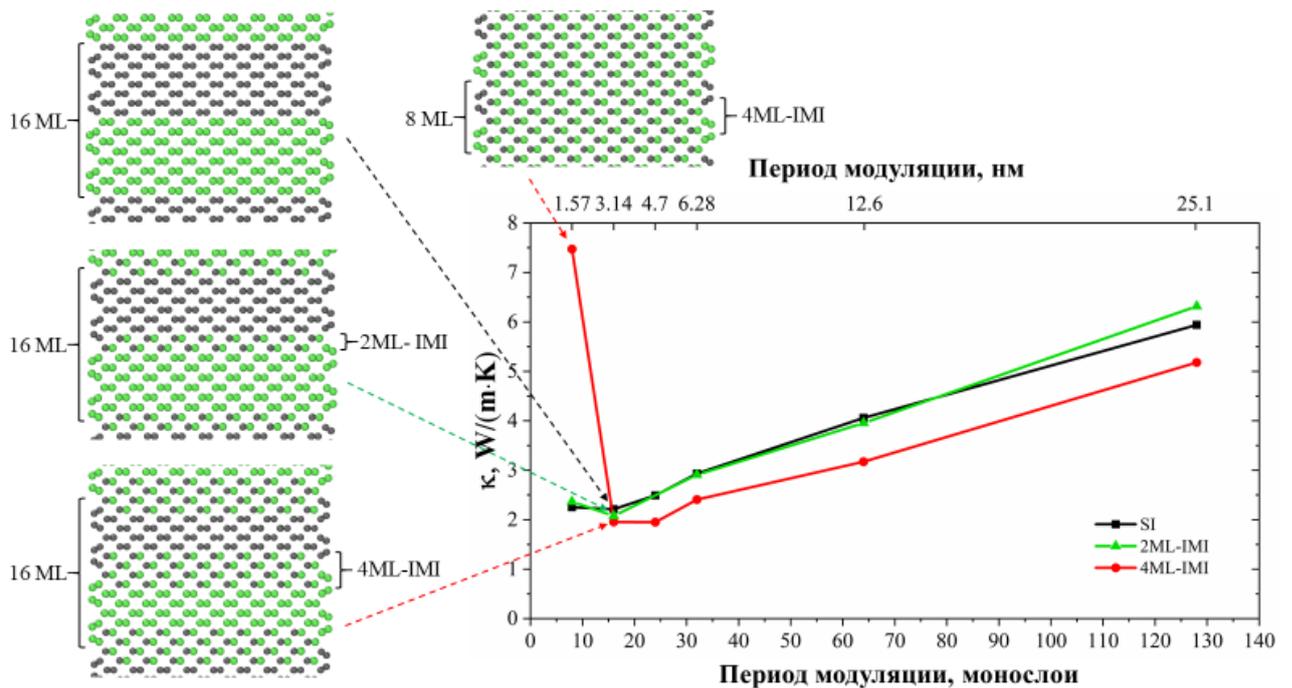


Рисунок 3 – Зависимость теплопроводности от периода модуляции

Таким образом, для эффективного уменьшения коэффициента теплопроводности в SiGe нанопрове типа ядро-оболочка целесообразно использовать наноструктуры с Ge оболочкой и Si ядром. В этом случае коэффициент теплопроводности оказался менее 10 Вт/(м·К). Что касается структуры сегментного типа, то целесообразно использовать наноструктуры со смешанными границами толщиной 4 монослоя. При этом значение коэффициента теплопроводности может быть около 2 Вт/(м·К).

Полученные результаты смогут стать отправной точкой для дальнейшего исследования SiGe нанопровов с чередующимися Si/Ge слоями в ядре. Не исключено, что SiGe нанопровы 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. Так же следует рассмотреть нанопровы в виде чередующихся сегментов Si и Ge вдоль оси нанопровы для других экспериментально наблюдаемых ориентаций, а именно $\langle 111 \rangle$, $\langle 112 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$.