

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ТОНКИХ ПЛЁНОК SiGe

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

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

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

В данной работе представлены результаты исследования теплопроводности для тонких плёнок SiGe с ориентацией $\langle 110 \rangle$, различными толщинами слоев и внутренних границ раздела. Установлены морфологии тонких плёнок с минимальными значениями теплопроводности, а также выявлено влияние толщины слоев и переходных границ на теплопроводность.

В настоящее время огромный потенциал для исследований имеют термоэлектрические материалы. На основе этих материалов можно создавать термоэлектрические генераторы, работающие на эффекте Зеебека, и холодильные установки, работающие на эффекте Пельтье. Однако, эффективность термоэлектрических материалов в настоящее время невысокая, что негативно сказывается на КПД этих устройств. Эффективность термоэлектрических материалов определяется с помощью безразмерного коэффициента ZT.

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

где S - коэффициент Зеебека, σ – электропроводность материала, T – температура, κ_e и κ_l - электронная и решеточная составляющие теплопроводности соответственно. Одной из возможностей увеличения эффективности термоэлектрических материалов является снижение решеточной составляющей теплопроводности, так как электронная составляющая теплопроводности и электропроводность материала связаны между собой законом Видемана-Франца. Снижение теплопроводности в этом случае происходит из-за рассеяния фононов в широком диапазоне частот на внутренних границах раздела между слоями Si и Ge, и на точечных дефектах в кристаллической решетке.

Тонкие пленки по толщине имели размеры 8, 16, 24, 48 монослоев в Si/Ge ячейке. Переходный слой между Si и Ge создавался путем замены атомов Si на атомы Ge и, наоборот, в зеркальном порядке. В качестве примера на рисунке 1 представлены модели тонкопленочных структур (вид сбоку) для ориентации $\langle 110 \rangle$ с разной толщиной слоев Si и Ge и разной толщиной переходного слоя. Теплопроводность измерялась как перпендикулярно направлению $[110]$ (перпендикулярно слоям), так и параллельно направлениям $[110]$ и $[001]$ (параллельно слоям).

Расчет теплопроводности проводился с помощью метода неравновесной молекулярной динамики, реализованного в программном пакете LAMMPS. Для описания межатомного взаимодействия между атомами Si и Ge использовался потенциал Терсоффа. Коэффициенты решеточной составляющей теплопроводности определялись из закона Фурье:

$$dQ = \kappa_i \frac{dT}{dx_i} S$$

где Q – тепловой поток, κ – коэффициент теплопроводности, $\frac{dT}{dx_i}$ – градиент температуры в структуре, S – площадь поперечного сечения структуры. Для создания теплового потока в системе на концах структуры располагались термостаты с температурами 310K горячего слоя и 290K холодного слоя.

На рисунке 2а представлена зависимость теплопроводности от количества слоев Si и Ge для ориентации $\langle 110 \rangle$. Проанализировав зависимости можно сделать вывод, что минимальное значение теплопроводности достигается при распространении теплового потока перпендикулярно слоям. Для плёнок, в которых тепловой поток распространялся вдоль слоев значения теплопроводности выше. Это связано с тем, что теплопроводность, в общем случае, является анизотропным свойством кристалла, и, как следствие, для разных направлений будет разная групповая скорость фононов [2].

На рисунке 2б представлена зависимость теплопроводности от толщины переходного слоя. Снижение теплопроводности в данном случае вызывается дополнительным рассеянием фононов на границе раздела между Si и Ge. Однако, для тонких плёнок с толщиной 8 монослоев в Si/Ge ячейке теплопроводность при 4 монослойной смешанной границе оказалась немного выше. Это связано с тем, что в данном случае получается идеальный твердый раствор, в котором отсутствует один механизм рассеяния – рассеяние на внутренних границах раздела.

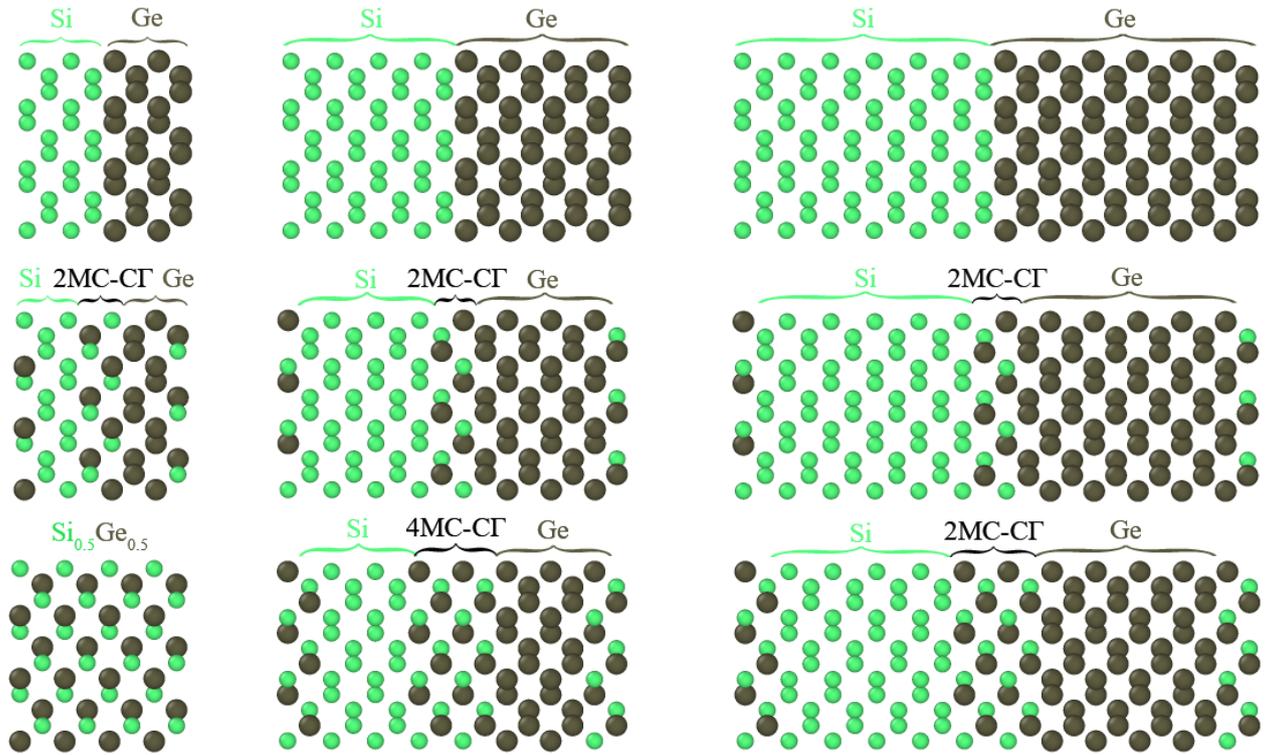


Рисунок 1 – Модель тонкопленочной структуры для ориентации <110>

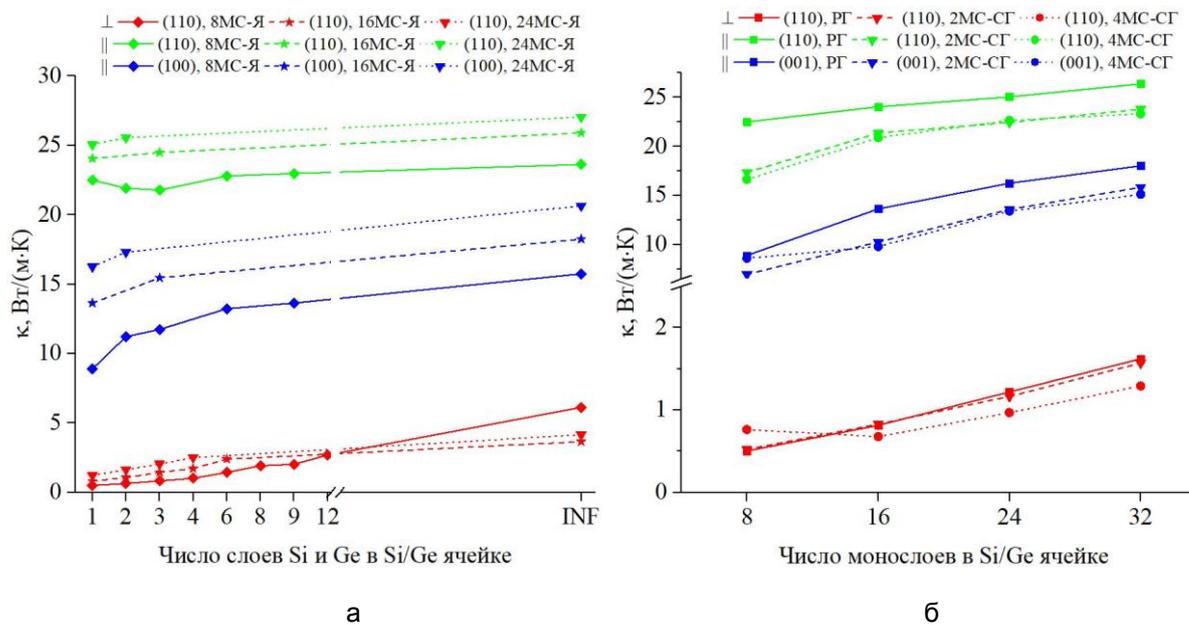


Рисунок 2 – Зависимость теплопроводности от количества слоев (а) и толщины переходного слоя (б) для ориентации <110>

Таким образом, проведен расчет теплопроводности тонких пленок SiGe. Полученные зависимости показали, что снизить решеточную составляющую теплопроводности можно путем уменьшения размеров пленки и добавлением внутренних границ раздела.

Список использованных источников:

1. Anisotropic heat conduction in cubic crystals in the boundary scattering regime / A.K. McCurdy, H. J. Maris and C. Elbaum// *Phys. Rev. B* 2, 4077 – Published 15 November 1970.
2. Thermal conductivity engineering of bulk and one-dimensional Si-Genanoarchitectures / Ali Kandemir, AybekOzden, TahirCagın, CemSevik // *Science and Technology of Advanced Material.* – 2017. – Vol. 18, NO. 01, P. 187-196.