

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК 539.216.2-026.657

Хомец
Александр Леонидович

Влияние морфологии на теплопроводность тонких пленок SiGe

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра технических наук
по специальности 1-41 80 03 «Нанотехнологии и наноматериалы в
электронике»

Научный руководитель
Мигас Дмитрий Борисович
Доктор физико-математических
наук, профессор

Минск 2020

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время одной из главных проблем современной цивилизации остается получение экологически чистой и возобновляемой энергии. Наиболее удобная и универсальная форма энергии для практического применения – электрическая. В связи с этим, огромное значение имеет разработка наиболее эффективных методов её получения и преобразования.

Большое внимание было обращено на твердотельные термоэлектрические генераторы, которые создаются на основе термоэлектрических материалов. Известно, что около 70 процентов энергии, которая вырабатывается с помощью полезных ископаемых, например на теплоэлектростанциях или в автомобилях, рассеивается в виде тепла. Термоэлектрические генераторы способны часть этой потерянной энергии преобразовать в электричество. Они имеют ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами, а именно: простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надежность и возможность миниатюризации без потери эффективности. Существует ряд областей, где термоэлектрические генераторы незаменимы, а именно, они используются для питания электричеством космических аппаратов для исследования дальнего космоса. В последнее десятилетие крупные автомобильные компании начали активно проводить исследования и внедрять в выхлопную систему автомобилей термоэлектрические генераторы для питания бортовой электроники, что может существенно повысить экономичность автомобилей с двигателями внутреннего сгорания.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы магистерской диссертации. 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 по нескольким причинам. Во-первых, в последнее время было предложено большое количество архитектур термоэлектрических преобразователей с использованием наноструктур, при помощи которых можно существенно уменьшить коэффициент решеточной составляющей теплопроводности, практически не влияя на электропроводность материала. Во-вторых, постоянно совершенствуются методы получения наноструктур с различной морфологией, составом и межфазовыми границами. В-третьих, можно использовать класс экологически чистых материалов, таких как кремний и германий, а также хорошо отработанную кремниевую технологию, что позволит существенно снизить цену производства наноструктурированных термоэлектрических материалов.

Цели и задачи исследования. Целью магистерской диссертации является определение влияния различных морфологий и межфазовых границ тонкопленочных структур на основе Si и Ge на коэффициент решеточной составляющей теплопроводности.

Для достижения цели, поставленной в данной магистерской диссертации, необходимо решить следующие задачи:

- Провести анализ существующих типов структур на основе соединений IV-й, а также группы A^{III}B^V;
- Осуществить генерацию тонкопленочных структур из Si и Ge с различной морфологией и имеющих межфазовые границы;
- Осуществить расчет коэффициента решеточной составляющей теплопроводности тонкопленочных структур Si и Ge, используя метод неравновесной молекулярной динамики;
- Провести анализ полученных результатов и сделать заключение об эффективности использования конкретных морфологий тонкопленочных структур Si и Ge для прямого преобразования тепловой энергии в электрическую.

Объектом исследования являются кремний-германиевые тонкопленочные структуры.

Предметом исследования является решеточная теплопроводность.

Область исследования: Содержание диссертационной работы соответствует образовательному стандарту высшего образования второй ступени (магистратуры) специальности 1-41 81 03 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике».

Научная новизна диссертационной работы заключается в использовании наноструктурированных материалов на основе тонкопленочных структур Si и Ge с различной морфологией для уменьшения длины свободного пробега фононов за счет рассеяния на межфазовых границах и поверхности.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Тонкопленочные структуры Si и Ge с ориентациями $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ и толщинами ($\sim 1,1$ и $1,5$ нм соответственно), обладают различными значениями коэффициента решеточной составляющей теплопроводности при распространении теплового потока вдоль направления $[110]$ ($5,1$ и $22,4$ Вт/(м·К) соответственно), что обусловлено влиянием поверхности и межфазовыми границами.

Личный вклад магистранта заключается в проведении анализа литературы, генерации тонкопленочных структур из Si и Ge с разной морфологией и расчете коэффициента теплопроводности.

Апробация и внедрение результатов исследования

Результаты исследования были представлены на конференциях: 55-я научная конференция аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 22-26 апреля 2019 г. БГУИР, 56-я научная конференция аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 20 мая 2020 г. БГУИР, VIII международная научная конференция, Минск, 10-12 октября 2018 г. БГУ.

Структура и объем работы. Структура диссертационной работы обусловлена целью, задачами и логикой исследования. Работа состоит из введения, четырех глав и заключения, библиографического списка. Общий объем диссертации – 65 страниц. Работа содержит 2 таблицы, 44 рисунка. Библиографический список включает 41 наименование.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** описано современное состояние проблемы термоэлектрических материалов, в частности их низкой эффективности; определены основные направления исследования, а также дается обоснование актуальности темы диссертационной работы.

В **общей характеристике работы** сформулированы цели и задачи диссертационной работы, даны сведения об объекте исследования и обоснован его выбор, представлено положение, выносимое на защиту, приведены сведения об апробации результатов диссертационной работы.

В **первой** главе рассматриваются общие сведения о термоэлектрических материалах. Описаны пути увеличения эффективности термоэлектрических объемных материалов.

Во **второй** главе рассматриваются способы снижения решеточной составляющей теплопроводности при использовании наноструктур. Описаны процессы, происходящие в наноструктурах, которые приводят к снижению решеточной теплопроводности.

В **третьей** главе описан метод молекулярной динамики, с помощью которого была рассчитана решеточная составляющая теплопроводности в данной диссертационной работе.

В **четвертой** главе описана экспериментальная часть магистерской диссертации. Представлены полученные результаты, а также проведен их анализ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование наноструктур в термоэлектрических устройствах весьма перспективно в настоящее время, так как они, потенциально, могут стать заменой нынешним термоэлектрическим материалам по ряду причин: в них можно нарушить взаимосвязь теплопроводности и электропроводности, и влиять на данные параметры по отдельности, что может способствовать увеличению эффективности термоэлектрического материала. Также можно использовать класс экологически чистых материалов, таких как кремний и германий, а также хорошо отработанную кремниевую технологию, что позволит существенно снизить цену производства наноструктурированных термоэлектрических материалов.

В результате выполнения магистерской диссертации было осуществлено исследование влияния морфологии на решеточную составляющую теплопроводности тонкопленочных структур Si/Ge методом неравновесной молекулярной динамики. Было установлено, что на решеточную теплопроводность могут влиять несколько параметров, а именно толщина слоев и их количество, кристаллографическое направление, перемешанные границы раздела, периодичность структуры, а также разные ориентации поверхности.

Для разных кристаллографических направлений теплопроводность может отличаться в несколько раз. Для всех трех рассматриваемых ориентаций при распространении теплового потока перпендикулярно слоям, то есть для ориентации $\{110\}$ перпендикулярно направлению $[110]$, для ориентации $\{100\}$ перпендикулярно направлению $[100]$ и для ориентации $\{111\}$ перпендикулярно направлению $[111]$, теплопроводность при толщине Si/Ge ячейки 8 моноатомных слоев имеет самые низкие значения, и равна для ориентации $\{110\} \approx 0,52$ Вт/(м·К), для ориентации $\{100\} \approx 0,36$ Вт/(м·К) и для ориентации $\{111\} \approx 0,51$ Вт/(м·К).

При распространении теплового потока параллельно слоям значения теплопроводности обычно выше, однако также зависят от направления. Для ориентации $\{110\}$, при толщине Si/Ge ячейки 8 моноатомных слоев, минимальное значение решеточной теплопроводности вдоль направления $[110]$ отличается почти в 2,5 раза и составляет 22,49 Вт/(м·К), а вдоль направления $[100]$ 9,2 Вт/(м·К). Для ориентации $\{111\}$ теплопроводность вдоль направлений $[100]$ и $[112]$ равна 15,7 и 15,4 Вт/(м·К) соответственно.

Также было обнаружено, что для тонких пленок с ориентациями $\{110\}$ и $\{100\}$ теплопроводность вдоль одного и того же направления распространения теплового потока, а именно вдоль $[110]$, отличается в 4,4 раза и имеет значения

22,4 и 5,1 Вт/(м·К) соответственно. Такое снижение обусловлено различием интенсивности фонон-поверхностного рассеяния на разных свободных поверхностях тонких пленок.

Добавление перемешанных границ с разной толщиной также способствует снижению решеточной составляющей теплопроводности. В данной работе были рассмотрены перемешанные границы со структурой упорядоченного твердого раствора $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$. В зависимости от ориентации теплопроводность может быть дополнительно снижена на $\approx 7\text{-}30\%$. Однако, для тонких пленок с толщиной Si/Ge ячейки в 8 моноатомных слоев, добавление перемешанной границы в 4 моноатомных слоя приводит к образованию упорядоченного твердого раствора. Это объясняется отсутствием фонон-интерфейсного механизма рассеяния.

Также были рассмотрены объемные структуры с бесконечным количеством Si/Ge ячеек, то есть объемные структуры с бесконечным количеством Si и Ge слоев. В таких структурах исследовалась зависимость решеточной теплопроводности от периодичности. При распространении теплового потока перпендикулярно слоям в сверхрешетках теплопроводность сначала снижается до 3,6 Вт/(м·К) (в случае ориентации $\{110\}$) и 3,9 Вт/(м·К) (в случае ориентации $\{100\}$), а затем, при толщине Si/Ge ячейки в 32 моноатомных слоя увеличивается, и при толщине Si/Ge ячейки в 8 моноатомных слоев достигает значений 6,1 Вт/(м·К) (в случае ориентации $\{110\}$) и 5,4 Вт/(м·К) в случае ориентации $\{100\}$). Это объясняется тем, что при уменьшении периодичности сверхрешетки будут образовываться когерентные фононы вследствие двух причин: уменьшения роли фонон-фононного и фонон-поверхностного рассеяний и увеличения зеркального рассеяния фононов на границах раздела, что приводит в совокупности к интерференции падающих и отраженных упругих волн с одинаковыми фазами. При распространении теплового потока вдоль слоев для данных структур подобной тенденции не наблюдается.

Полученные результаты могут быть использованы для создания термоэлектрических материалов с более высокой эффективностью, которые могут быть использованы в термоэлектрических генераторах или холодильных установках, однако, учитывая тот факт, что эффективность преобразования тепловой энергии в термоэлектрических материалах определяется добротностью ZT , для определения пригодности Si/Ge тонких пленок как термоэлектрика, следует определить фактор мощности $S^2\sigma$. Также результаты могут быть использованы для дальнейшего исследования фундаментальных свойств подобных наноструктур.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Хомец А.Л. Исследование теплопроводности тонких пленок Si/Ge для ориентации $\langle 001 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ методом молекулярной динамики / А. Л. Хомец, И. И. Холяво, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Радиотехника и электроника: материалы 55-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 22 - 26 апреля 2019 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. - Минск, 2019.

2. Хомец А.Л. Влияние морфологии на теплопроводность тонких плёнок SiGe / А. Л. Хомец, И. И. Холяво, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Радиотехника и электроника: материалы 56-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 20 мая 2020 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. - Минск, 2020.

3. Влияние морфологии на стабильность нанощнуров арсенида галлия / И. И. Холяво, А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Материалы и структуры современной электроники : материалы VIII Междунар. Науч. Конф., Минск, 10-12 окт. 2018 г. / редкол.: В. Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.] – Минск: БГУ, 2018. С. 313-317.