

## ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ И МОРФОЛОГИИ НА РЕШЕТОЧНУЮ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ Si/Ge НАНОШНУРОВ СЕГМЕНТНОГО ТИПА

Холяво И.И.<sup>1</sup>, Хомец А.Л.<sup>1</sup>, Сафронов И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
г. Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет  
г. Минск, Республика Беларусь

Мигас Д.Б. – д.ф.-м.н., профессор

В работе проведено исследование влияния ориентации и морфологии нанощнуров Si и Ge с диаметром  $\sim 5$  нм на решеточную теплопроводность. Обнаружено, что для нанощнуров Si/Ge со структурой сегментного типа возможно достичь коэффициента теплопроводности менее 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).

Тепло непрерывно теряется в окружающую среду в виде тепловой энергии из-за ограниченной эффективности (30% -40%) тепловых двигателей. Термоэлектрический эффект обеспечивает способ преобразования этой потерянной тепловой энергии в полезную электрическую энергию. Термоэлектрические генераторы являются компактными, прочными, бесшумными и надежными, поскольку не содержат движущихся частей. Современные применения ограничены, потому что эффективность термоэлектрических материалов все еще довольно низка. Теоретические работы и лабораторные образцы в последнее десятилетие показали потенциал для значительного улучшения термоэлектрических характеристик при использовании наноструктурированных материалов, таких как нанощнуры. Использование нанощнуров может позволить создать термоэлектрические материалы нового поколения с более высокой эффективностью. [1]

В данной работе рассматривались нанощнуры из Si и Ge в виде структур сегментного типа с резкими (когерентными) границами раздела и направлением роста  $\langle 011 \rangle$ ,  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$ . Модели нанощнуров вырезались из объемного кристалла вдоль направления роста с формированием внешних граней в виде шестигранника и диаметром  $\sim 5,2$  нм (рисунок 1).

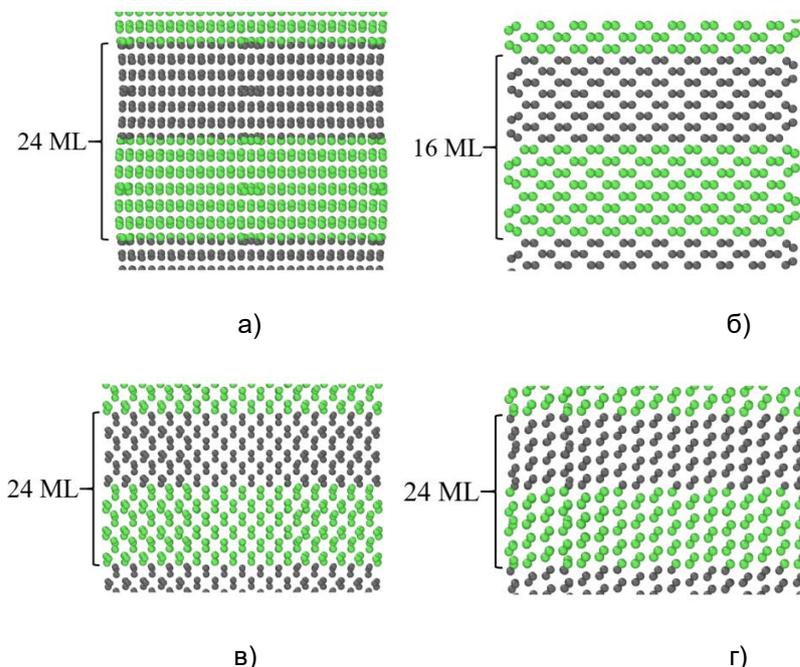


Рисунок 1 – Si/Ge нанощнуры со структурой сегментного типа с направлениями роста:  $\langle 111 \rangle$  (а),  $\langle 110 \rangle$  (б),  $\langle 100 \rangle$  (в),  $\langle 112 \rangle$  (г)

Моделирование решеточной теплопроводности для рассматриваемых нанострун вдоль их оси проводилось с помощью пакета LAMMPS, применяя метод неравновесной молекулярной динамики. Коэффициент теплопроводности определялся из закона Фурье:

$$\kappa_{\langle mnp \rangle} = -\frac{E}{2St(dT/dz)}, \quad (1)$$

где  $E$  – перенесенная тепловая энергия;  $2$  – коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях, вследствие периодических граничных условий;  $t$  – время моделирования;  $S$  – площадь поперечного сечения;  $dT/dz$  – градиент температуры в продольном направлении;  $\langle mnp \rangle$  – направления  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ , вдоль которых моделировалась теплопроводность. Межатомное взаимодействие для атомов кремния и германия описывалось с помощью потенциала Терсоффа.

Выявлено, что наиболее оптимальной структурой для применения в твердотельных термоэлектрических преобразователях для нанострун из кремния и германия оказалась структура с направлением роста  $\langle 112 \rangle$  с одинаковыми  $\{111\}$  и  $\{011\}$  гранями на поверхности (рисунок 2). Наиболее низкое значение коэффициента теплопроводности достигается для Si/Ge нанострун с направлением роста  $\langle 112 \rangle$  и длиной периода 2,71 нм или 24 монослоя (12 монослоев Si и 12 монослоев Ge) и равно 1,25 Вт/(м·К), в то время как значения теплопроводности для нанострун из чистого Si и Ge составляют 19,1 и 11,4 Вт/(м·К). Снижение теплопроводности в Si/Ge сегментных нанострунах с уменьшением периода модуляции обусловлено увеличением скорости фонон-интерфейсного рассеяния [2].

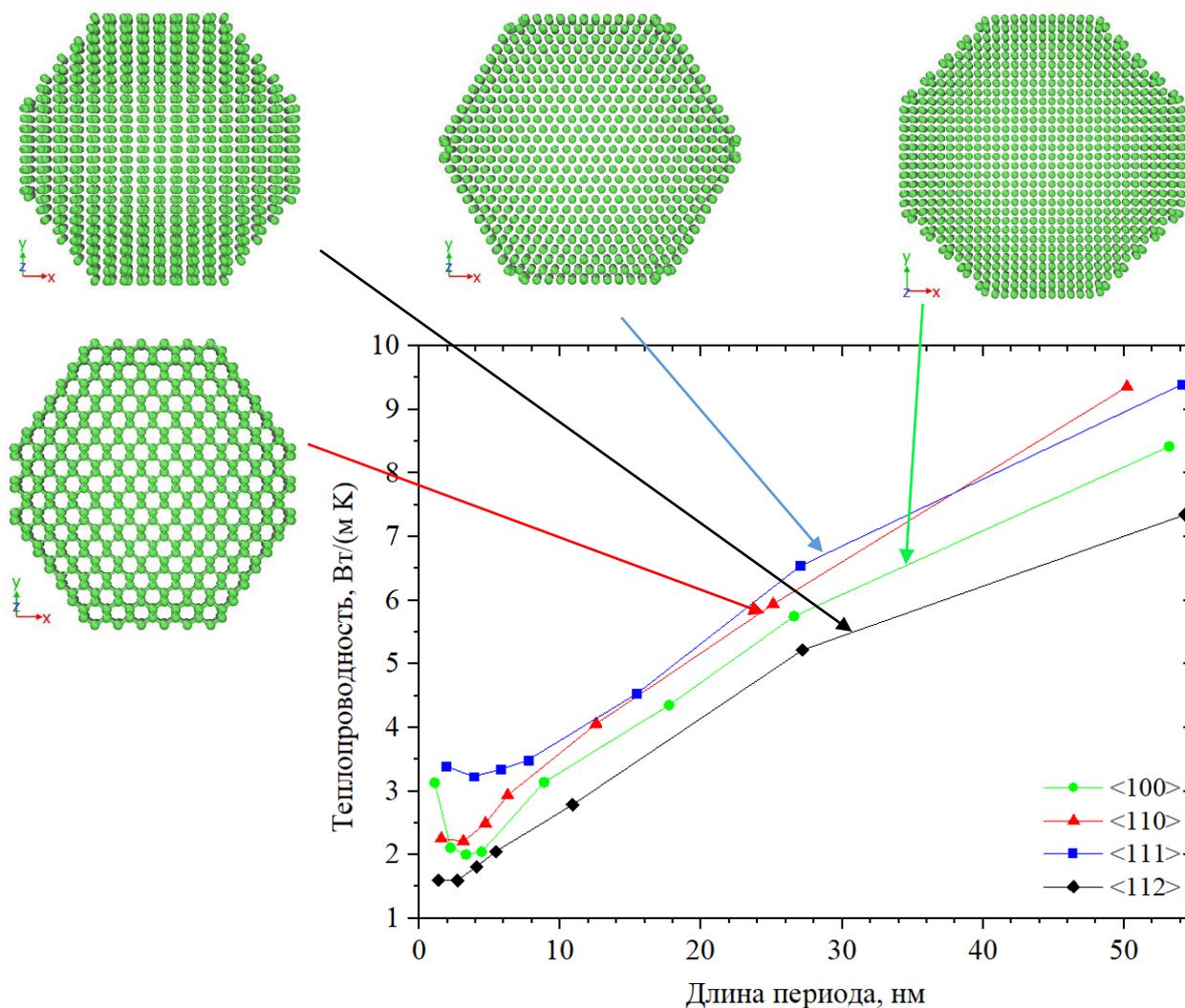


Рисунок 2 – Зависимость коэффициента теплопроводности Si/Ge сверхрешетчатых НШ ( $L \sim 100$  нм,  $d \sim 5$  нм) с различными ориентациями от длины периода модуляции

*57-я Научная Конференция Аспирантов, Магистрантов и Студентов БГУИР, 2021 г.*

Полученные результаты смогут стать отправной точкой для дальнейшего исследования SiGe наношнуров с чередующимися слоями. Не исключено, что SiGe наношнуры сегментного типа с перемешанными слоями могут обладать меньшим коэффициентом теплопроводности. Так же следует рассмотреть SiGe наношнуры типа ядро/оболочка для экспериментально наблюдаемых направлений роста, а именно  $\langle 011 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$ .

**Список использованных источников:**

- 1. High performance thermoelectric materials: Progress and their applications / Lei Yang, Zhi-Gang Chen, Matthew S. Dargusch, Jin Zou // Advanced Energy Materials, 2017. — V. 8, № 6.*
- 2. Si/Ge Superlattice Nanowires with Ultralow Thermal Conductivity / M. Hu, D. Poulikakos // Nano Lett, 2012. — V. 12, № 11. — P. 5487—5495.*