

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ В СЛОИСТЫХ Si/Ge ПЛЕНКАХ НА ПОПЕРЕЧНУЮ РЕШЕТОЧНУЮ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

Хомец А.Л.¹, Холяво И.И.¹, Сафронов И.В.²

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

²Белорусский государственный университет
г. Минск, Республика Беларусь

Мигас Д.Б. – д.ф.-м.н., профессор

В данной работе представлены результаты исследования теплопроводности для тонких слоистых пленок Si/Ge с (110), (100) и (111) кристаллографическими ориентациями. Установлены морфологии слоистых тонких пленок с минимальными значениями теплопроводности, а также выявлено влияние количества и толщины индивидуальных слоев на решеточную теплопроводность.

Одной из основных проблем в современном мире является получение возобновляемой энергии. Около 70% энергии, вырабатываемой с помощью полезных ископаемых на электростанциях или в автомобилях, рассеивается в виде тепла. В последние десятилетия большое внимание обращено на термоэлектрические материалы, поскольку они могут часть этого потерянного тепла преобразовать обратно в электричество. На основе термоэлектрических материалов создаются термоэлектрические генераторы и холодильные установки, работающие на эффекте Зеебека и Пельтье соответственно. Важнейшим недостатком термоэлектрических материалов является их низкая эффективность и как следствие низкий КПД устройств, разработанных на их основе. 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.

Ключевой подход увеличения термоэлектрической добротности термоэлектрических материалов на основе Si и Ge заключается в снижении решеточной теплопроводности. Существует технологическая возможность создания слоистых тонкопленочных структур с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии. Снижение теплопроводности в тонких слоистых пленках происходит из-за рассеяния фононов в широком диапазоне частот на внутренних границах раздела между слоями Si и Ge, на точечных дефектах в кристаллической решетке, а также на свободной поверхности данных слоистых структур. Целью данной работы является теоретическое исследование решеточной теплопроводности в слоистых тонких пленках Si/Ge с помощью метода неравновесной молекулярной динамики, обусловленное влиянием свободной поверхности данных структур.

В данной работе рассматривались слоистые Si/Ge тонкие пленки с (110), (100) и (111) ориентациями с резкими границами раздела. Теплопроводность измерялась в поперечном направлении. Толщина индивидуальных слоев Si и Ge варьировалась от 8 до 64 монослоев. Тонкие пленки создавались с помощью программы для визуализации и анализа данных OVITO. Для ориентации (100) производилась димеризация атомов на поверхности путем смещения определенных атомов навстречу друг другу для образования связи между ними.

Расчет теплопроводности проводился с помощью метода неравновесной молекулярной динамики, реализованного в программном пакете LAMMPS [1]. Для описания межатомного взаимодействия между атомами Si и Ge использовался потенциал Терсоффа. Коэффициенты решеточной составляющей теплопроводности определялись из закона Фурье:

$$\kappa_{<mn>} = - \frac{E}{S \cdot t \cdot \left(\frac{dT}{dx}\right)} \quad (2)$$

где E – перенесенная тепловая энергия, κ – коэффициент теплопроводности, $\frac{dT}{dx_i}$ – градиент температуры в структуре, t – время моделирования, S – площадь поперечного сечения. Площадь поперечного сечения задавалась большей $\sim 60 \text{ нм}^2$. Для создания теплового потока в системе на концах структуры располагались термостаты с температурами 310K горячего слоя и 290K холодного слоя.

На рисунке 1 представлена зависимость решеточной теплопроводности для слоистых Si/Ge тонких пленок. Проанализировав зависимости можно сделать вывод, что с увеличением длины

периода и/или числа периодов имеет место увеличение поперечной решеточной теплопроводности для всех кристаллографических ориентаций. В слоистых структурах эффективная средняя длина свободного пробега может существенно превышать длину периода. Увеличение поперечной решеточной теплопроводности обусловлено возрастанием средней длины свободного пробега фононов при увеличении толщины самой структуры [2-4]. Это позволяет фононам преодолевать большие расстояния между актами рассеяния на границах раздела между Si и Ge. Как отмечают авторы работы [3] в структурах с малыми периодами меньше 10 нм основной вклад в теплоперенос вносят фононы с длиной волны от 1 до 5 нм, а спектры средней длины свободного пробега фононов смещаются к более низким значениям. Из этого следует, что при теплопереносе в поперечном направлении ярко выражены эффекты поверхностного рассеяния и фононы с длинами волн больше 5 нм эффективно рассеиваются за счет граничного и поверхностного рассеяния и не участвуют в теплопереносе.

Также было установлено, что минимальное значение теплопроводности в 0,34 Вт/(м·К) достигается в пленках с ориентацией (100) с толщиной периода в 1,08 нм. Для пленок с ориентациями (111) и (100) наименьшие значения теплопроводности равны 0,51 Вт/м·К (1,88 нм) и 0,5 Вт/м·К (1,53 нм) соответственно. Следует отметить, что отличие в толщине пленок получается вследствие различия размеров элементарных ячеек данных ориентаций.

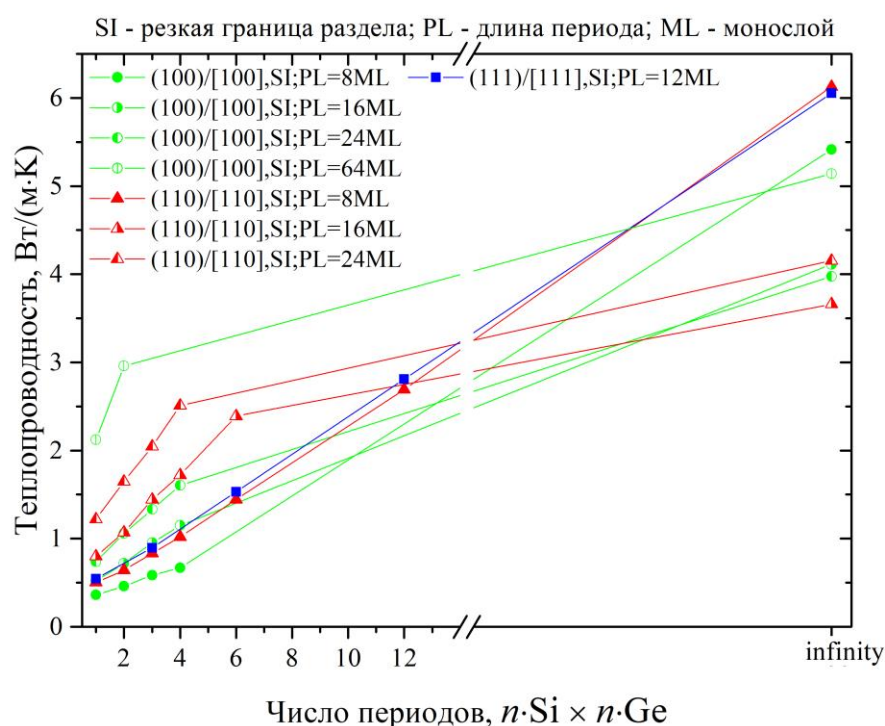


Рисунок 1 – Зависимость решеточной теплопроводности в поперечном направлении от длины и числа периодов для (100), (110) и (111) ориентаций свободной поверхности

Таким образом, проведен расчет теплопроводности слоистых Si/Ge тонких пленок с помощью метода неравновесной молекулярной динамики. Полученные зависимости показали, что снизить решеточную составляющую теплопроводности можно путем уменьшения периода слоистой структуры, а также выбором определенной кристаллографической ориентации. При небольшом числе периодов имеет место существенное влияние поверхностной ориентации на решеточную теплопроводность, однако по мере увеличения количества слоев имеет место ослабление рассеяния фононов на поверхности и усиление рассеяния на внутренних границах раздела.

Список использованных источников:

1. Plimpton, S. *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics* / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117, № 1. – P. 1 – 19.
2. Hylgaard, P. *Phonon superlattice transport* / P. Hylgaard, G. D. Mahan // *Physical Review B*. – 1997. – Vol. 56, № 17.
3. Malhotra, A. *Cross-plane thermal conductivity in superlattices: Impact of multiple length scales on phonon transport* / A. Malhotra, K. Kothari, M. Maldovan // *Journal of Applied Physics*. – 2019. – Vol. 125, № 4.
4. Kothari, K. *Cross-plane heat conduction in III-V semiconductor superlattices* / K. Kothari, A. Malhotra, M. Maldovan // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2019. – Vol. 31, № 34.