

ФОНОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОПРОВОЛОК Si/Ge

Холяво И.И.¹, Хомец А.Л.¹

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

Мигас Д.Б. – д.ф.-м.н., профессор

В работе проведено исследование влияния морфологии теплопроводность нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка с <100>, <110>, <112> и <111> кристаллографическими ориентациями и диаметром около 5 нм. Обнаружено, что для <112>-ориентированных нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка при объемной доле ядра ~24 % теплопроводность является наименьшей (5,4 Вт/(м·К)), в то время как значения теплопроводности для нанопроволок из чистого Si и Ge составляют 13,5 и 7,4 Вт/(м·К), соответственно.

Термоэлектрический эффект обеспечивает способ преобразования потерянной тепловой энергии в полезную электрическую энергию, что может привести к экономии топлива и сокращению выбросов парниковых газов. Термоэлектрические генераторы являются компактными, прочными, бесшумными и надежными, поскольку не содержат движущихся частей. Современные применения ограничены, потому что эффективность термоэлектрических материалов все еще довольно низкая [1].

Термоэлектрическая добротность непосредственно связана с эффективностью КПД термоэлектрического преобразователя, поэтому это очень удобный параметр для сравнения потенциальной эффективности преобразователей, использующих различные материалы. Эффективность термоэлектрического преобразования определяется величиной:

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

σ – электропроводность материала, S – его термоэдс (коэффициент Зеебека), κ – теплопроводность, T – рабочая температура или средняя температура $(T_1 + T_2)/2$ преобразователя, T_1 и T_2 – температуры холодного и горячего контактов соответственно, теплопроводность $\kappa = \kappa_e + \kappa_L$ есть сумма электронного вклада κ_e и решеточного вклада κ_L .

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 [2].

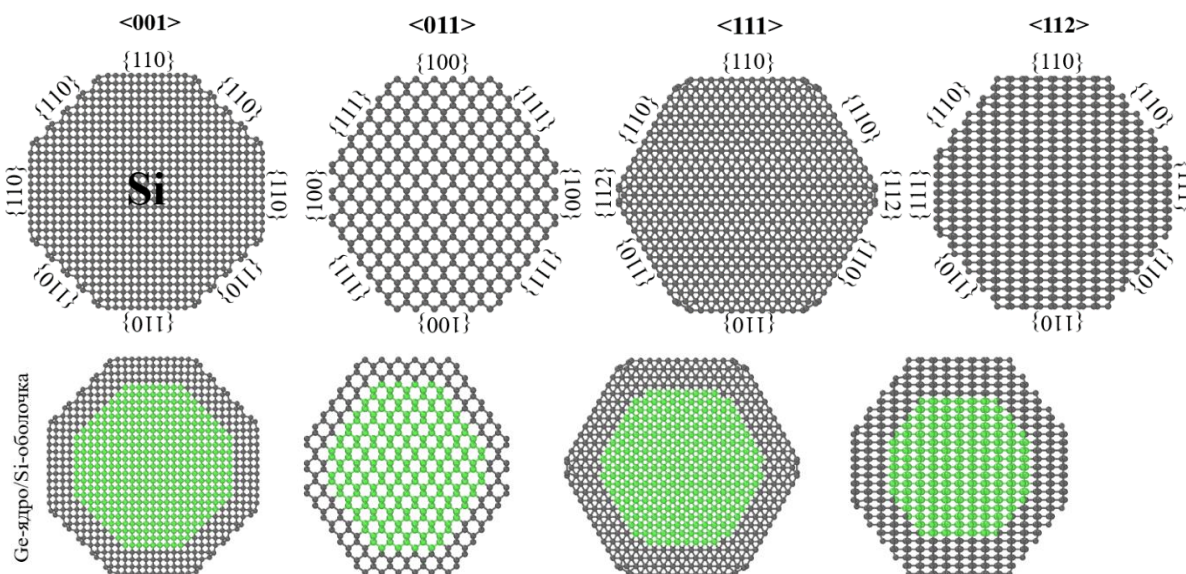


Рисунок 1 – Сечения нанопроволок Si/Ge типа ядро-оболочка с <001>, <011>, <111> и <112> направлениях роста. Все ориентации и грани обозначены.

В работе рассматривались нанопроволоки Si/Ge типа ядро/оболочка с экспериментально наблюдаемыми <100>, <110>, <112> и <111> кристаллографическими ориентациями. Модели нанопроволок вырезались из объемного кристалла вдоль направления роста с формированием внешних граней и сечением в виде шестигранника. Диаметр и длина нанопроволок составили соответственно около 5,2 нм и 100 нм (рисунок 1). Моделирование решеточной теплопроводности для рассматриваемых нанопроволок 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.

На рисунке 2 показана зависимость коэффициента теплопроводности исследуемых Si/Ge нанопроволок типа ядро-оболочка с резкими продольными границами раздела от объемного содержания ядра и его типа. Выявлено, что наибольшее снижение теплопроводности характерно для структур Si-ядро/Ge-оболочка вне зависимости от направления роста нанопроволок. Минимальная теплопроводность 5,4 Вт/(м·К) характерна для <112>-ориентированных нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка при объемной доле ядра ~ 24 %. Полученные закономерности можно объяснить несколькими причинами: (а) различием коэффициента теплопроводности для Si и Ge при применении их в качестве материала ядра или оболочки, (б) влиянием рассеяния фононов продольными границами раздела и (в) возникновением когерентного фононного резонанса, свойственным структурам с архитектурой типа ядро-оболочка [3].

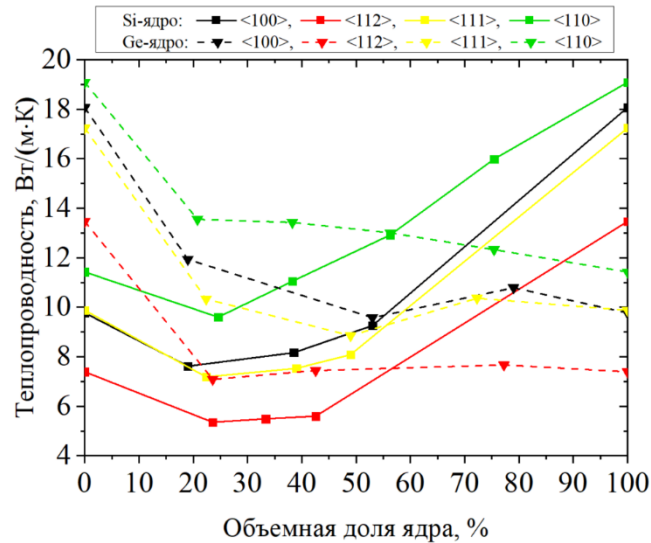


Рисунок 2 – Зависимость теплопроводности нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка с различными ориентациями от объемной доли ядра

В результате работы была исследована теплопроводность нанопроволок из кремния и германия типа ядро-оболочка, которые наблюдались экспериментально. Результаты свидетельствуют о потенциальной возможности применения Si/Ge nanostructures со структурой типа ядро-оболочка в термоэлектрических устройствах на основе Si и Ge. Предлагается использовать нанопроволоки с ориентацией <112> и структурой типа Si-ядро/Ge-оболочка в термоэлектрических устройствах, так как данный тип морфологии позволяет наиболее эффективно снизить теплопроводность.

Список использованных источников:

1. Yang, L. *High performance thermoelectric materials: Progress and their applications* / L. Yang, Z.-G. Chen, M. S. Dargusch, J. Zou // *Advanced Energy Materials*. – 2017. – Vol. 8., N 6.
2. Goktas N. I. *Nanowires for energy: A review* / N. I. Goktas, P. Wilson, A. Ghukasyan, D. Wagner // *Applied Physics Reviews*. – 2018. – Vol. 5, N 4.
3. Jie, C. *Impacts of Atomistic Coating on Thermal Conductivity of Germanium Nanowires* / J. Chen, G. Zhang, and B. Li // *Nano Lett.* – 2012. – Vol. 12. N. 6. – P. 2826 – 2932.