

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ И ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В ПРОДОЛЬНОЙ ФОНОННОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СЛОИСТЫХ ПЛЕНОК Si И Ge

Хомец А.Л.¹, Холяво И.И.¹

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

Мигас Д.Б. – д.ф.-м.н., профессор

В данной работе представлены результаты исследования фононной теплопроводности для тонких слоистых пленок Si/Ge с (100), (110) и (111) кристаллографическими ориентациями. Было установлено, что при продольном тепловом транспорте вдоль направления [110] имеет место существенное фонон поверхностное рассеяние для тонкопленочных структур с (100) ориентацией и незначительное для (110) и (111) ориентаций. Также, дополнительным фактором снижения теплопроводности является создание свободной поверхности из одного материала.

В последние десятилетия активно ведется поиск новых термоэлектрических материалов. В связи с этим большое внимание уделяется соединениям на основе Si и Ge, так как они имеют ряд преимуществ по сравнению с традиционными термоэлектрическими материалами на основе Te, Bi и Sb, а именно отработанная кремниевая технология и низкая токсичность. 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 – соответственно электронная и решеточная составляющие теплопроводности.

Основным способом увеличения термоэлектрической добротности термоэлектрических материалов на основе Si и Ge является снижение фоновой (решеточной) теплопроводности. Снижение теплопроводности в структурах с пониженной размерностью, таких как тонкие пленки, происходит из-за рассеяния фононов в широком диапазоне частот на внутренних границах раздела, а также на свободной поверхности.

В данной работе рассматривались слоистые Si/Ge тонкие пленки с (100), (110) и (111) ориентациями с резкими границами раздела, а также пленки с терминирующими слоями, в которых поверхностные слои выполнены из одного материала (в нашем случае Ge). Теплопроводность рассчитывалась вдоль [110] кристаллографического направления. Данное направление было выбрано в связи с тем, что оно присутствует у всех трех ориентации, что дает возможность сравнить вклад свободной поверхности и внутренних границ раздела на рассеяние фононов. Толщина слоев была неизменной и составляла 8 моноатомных слоев (или ~1,13 и 1,6 нм) для ориентаций (100) и (110) и 12 моноатомных слоев (или ~1,96 нм) для (111) ориентации. Количество периодов варьировалось от 1 до 48. Под периодом понижается число Si/Ge. Использовались $p(2 \times 1)$, $p(1 \times 1)$ и $p(2 \times 1)$ поверхностные реконструкции для соответственно (100), (110) и (111) ориентаций пленок.

Моделирование теплопроводности проводилось методом неравновесной молекулярной динамики, реализованным в программном пакете LAMMPS [1]. Для описания межатомного взаимодействия между атомами S и Ge использовался потенциал Терсоффа. Коэффициенты фоновой составляющей теплопроводности определялись из закона Фурье:

$$\kappa_{\langle mnp \rangle} = - \frac{E}{2S \cdot t \cdot \left(\frac{dT}{dx} \right)} \quad (2)$$

Где E – перенесенная тепловая энергия, κ – коэффициент теплопроводности, $\frac{dT}{dx_i}$ – градиент температуры в структуре, t – время моделирования, S – площадь поперечного сечения, 2 – коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях. Площадь поперечного сечения задавалась большей ~60 нм². Для создания теплового потока в системе расставлялись термостаты с температурами 310 К для горячего слоя и 290 К для холодного слоя.

На рисунке 1 представлена зависимость фоновой теплопроводности для слоистых Si/Ge тонких пленок, а также для аналогичных пленок с терминирующими слоями из Ge. Проанализировав зависимости можно сделать вывод, что при уменьшении числа периодов с 48 до 1 имеет место существенное (почти в 4 раза с 19,1 до 5,12 Вт/(м·К)) снижение фоновой теплопроводности для (100) ориентации и незначительное (на ~5 (1,1 Вт/(м·К)) и ~8 % (1,9 Вт/(м·К)) соответственно) снижение для (110) и (111) ориентаций. При увеличении числа периодов повышается вклад в теплопроводность фононов, которые пересекают границы раздела и распространяются в соседних слоях [2], что и приводит к постепенному увеличению теплопроводности при увеличении числа периодов.

Также наблюдается роль влияния кристаллографической ориентации на величину теплопроводности. Для слоистых Si/Ge структур наблюдается следующая тенденция: $\kappa^{\text{Si/Ge}(100)} < \kappa^{\text{Si/Ge}(111)} < \kappa^{\text{Si/Ge}(110)}$. При распространении теплового потока вдоль направления [110] отличаются не только скорости фоновых рассеяния, но и групповые скорости фононов. Авторами работы [3] продемонстрировано, что у пленок Si(110) график частотной зависимости средневзвешенной по всем модам групповой скорости фононов располагается выше, чем у пленок Si(100) и Si(111). Продольная фоновая теплопроводность в основном определяется двумя параметрами: групповой скоростью и временем релаксации рассеяния фононов, которые для ориентации (110) являются наибольшими и наименьшими для (100), что объясняет полученную зависимость.

При добавлении к структуре Si/Ge дополнительного поверхностного слоя Ge можно также изменять фоновую теплопроводность структуры. При увеличении числа периодов с 1 до 24 разница в значениях теплопроводности между Si/Ge пленками и пленками с дополнительным слоем Ge постепенно уменьшается с 23 до 3 % для (110) ориентации и с 10 до 2 % для (111) ориентации. В

данном случае дополнительное снижение теплопроводности при малом числе периодов (до 24) обусловлено большей объемной долей менее теплопроводящей фазы из слоев Ge. Как известно, теплопроводность Si в $\sim 2,5$ раза выше, чем у Ge. При увеличении числа периодов, наоборот, объемная доля Si увеличивается и стремится к 50 % при ~ 48 периодах. Для ориентации (100) вследствие более сильного фонон-поверхностного и фонон-интерфейсного рассеяния наблюдается противоположная закономерность. Для данной ориентации значения теплопроводности у структур Si/Ge при малом числе периодов остаются меньше.

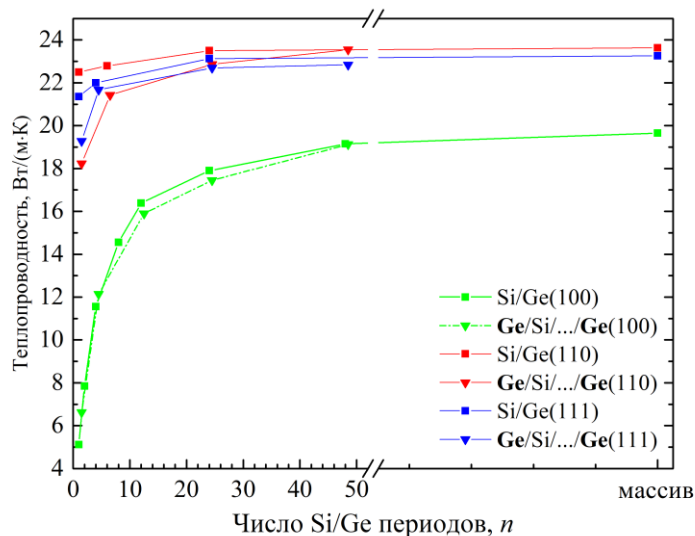


Рисунок 1 – Зависимость фононной теплопроводности в продольном [110] направлении от числа периодов для (100), (110) и (111) ориентированных тонкопленочных структур Si/Ge и Ge/Si/.../Ge

Таким образом, проведен расчет фононной теплопроводности тонких слоистых пленок Si/Ge, а также аналогичных структур с терминирующими поверхностями Ge с помощью метода неравновесной молекулярной динамики. Полученные зависимости показали, что при распространении теплового потока вдоль направления [110] ориентация (100) обладает наибольшей эффективностью рассеяния фононов в сравнении с ориентациями (110) и (111). Создание свободных поверхностей из одного материала (Ge) позволяет дополнительно снизить на $\sim 2-4$ Вт/(м·К) теплопроводность структур, но только для (110) и (111) ориентаций, причем данный эффект быстро исчезает при увеличении числа периодов свыше 10.

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. Kothari, K. Phonon Surface Scattering and Thermal Energy Distribution in Superlattices / K. Kothari, M. Maldovan // *Scientific Report*. – 2017. – Vol.7
3. Aksamija, Z. Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes / Z. Aksamija, I. Knezevic // *Phys. Rev. B*. – 2010. – Vol. 82.