

УДК 538.9

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ Si/Ge НАНОНИТЕЙ

К. Я. Исакова, к. ф.-м. н. Д. Л. Ника

Молдавский государственный университет
 Молдова, г. Кишинев
 isacova.calina@gmail.com, dlnika@yahoo.com

Теоретически исследован эффект падения решеточной теплопроводности в сегментированных нанонитях Si/Ge по сравнению с гладкими кремниевыми нанонитями, предсказанный ранее. Детально исследована зависимость этого эффекта от поперечного сечения сегментированных нанонитей. Исследования проведены в рамках модели гранецентрированной кубической решетки.

Ключевые слова: кремний, сегментированные нанонити, фононы, теплопроводность.

Эффективный контроль и управление тепловыми потоками в условиях сокращения размеров и увеличения плотности элементов в микро- и нанозлектронных приборах является одной из важных задач современной нанозлектроники [1]. Материалы с высокой теплопроводностью могут быть использованы для эффективного отвода тепла, в то время как материалы с пониженной теплопроводностью являются многообещающими для термоэлектрических применений.

Кремний, будучи одним из основных материалов полупроводниковых устройств, обладает преимущественно фононной теплопроводностью. Теплопроводность наноразмерных структур на базе кремния гораздо ниже, чем объемного материала, благодаря рассеянию фононов на границах наноструктуры и модификации фононного спектра, которая ведет к уменьшению групповой скорости фононов [2].

Целью настоящей работы было исследование фононных свойств и теплопроводности сегментированных нанонитей Si/Ge с сечением прямоугольной формы (см. рис. 1). В рамках модели гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки, нами был исследован эффект падения решеточной теплопроводности в сегментированных нанонитях [2] в зависимости от размеров их поперечного сечения. Схематическое изображение исследуемой структуры представлено на рис. 1.

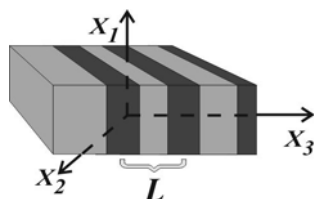


Рис. 1. Схематическое изображение сегментированной нанонити

Кристаллическая решетка кремния представляет собой две ГЦК подрешетки, сдвинутые одна относительно другой на четверть главной диагонали. В рамках модели динамики ГЦК решетки два сдвинутые ГЦК подрешетки совмещаются в одну с удвоением массы атомов в узлах решетки. В нашей модели было использовано три параметра – три силовые константы взаимодействия между атомами, которые были выражены через упругие константы объемного кремния. Уравнение движения атома было записано в виде

$$m\ddot{u}_i(\vec{n}) = F_i(n), \quad i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где $F_i(\vec{n})$ — компонента силы, действующая на узел (\vec{n}) со стороны других узлов; m — масса узла.

Для расчета теплового потока было использовано выражение, полученное в [2] из транспортно-го уравнения Больцмана в приближении времени релаксации, принимая во внимание одномерную плотность фононных состояний:

$$\Theta = \frac{1}{2\pi k_B T^2} \sum_{s=1, \dots, 3N} \int_0^{q_{\max}} (\hbar \omega_s(q_z) v_{z,s}(q_z))^2 \tau_{tot,s}(q_z) \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} dq_z, \quad (2)$$

где $\tau_{tot,s}$ — полное время релаксации фононов; s — число фононных ветвей; k_B — постоянная Больцмана; \hbar — постоянная Планка; T — абсолютная температура.

В наших расчетах были учтены три основных механизма рассеяния фононов: Umklapp-рассеяние, рассеяние на границах и рассеяние на примесях [2, 3]. Согласно правилу Матиссена, полное время релаксации фононов можно записать в следующем виде:

$$1/\tau_{tot,s}(q_z) = 1/\tau_{U,s}(q_z) + 1/\tau_{imp,s}(q_z) + 1/\tau_{B,s}(q_z), \quad (3)$$

где $\tau_{U,s}$ — время релаксации Umklapp-рассеяния, $\frac{1}{\tau_{U,s}(q_z)} = B(\omega_s(q_z))^2 T \exp(-C/T)$ [4];

$\tau_{imp,s}$ — время релаксации рассеяния фононов на примесях, $\frac{1}{\tau_{imp,s}(q_z)} = A(\omega_s(q_z))^4$ [4];

$\tau_{B,s}$ — время релаксации рассеяния фононов на границах

$$\frac{1}{\tau_{B,s}(q_z)} = \frac{1-p}{1+p} \frac{|v_{z,s}(q_z)|}{2} \left(\frac{1}{d_x} + \frac{1}{d_y} \right). \quad (4)$$

По формуле (2) были проведены расчеты для сегментированных нанонитей, состоящих из квантовых точек (КТ) кремния и германия. Толщина КТ составляла 4 монослоя (МС), поперечное сечения КТ и нити, соответственно, варьировалось от 9×9 МС (где $1 \text{ МС} = 0,27 \text{ нм}$) до 29×29 МС. В результате исследований было установлено, что тепловой поток в сегментированной Si/Ge-нанонити значительно снижается по сравнению с тепловым потоком в гладкой Si-нити; максимум отношения тепловых потоков гладкой и сегментированной нанонитей достигается при поперечном сечении порядка 19×19 МС. Наличие максимума связано с различной скоростью роста теплопроводности в сегментированной и гладкой нанонитях с увеличением площади их поперечного сечения.

Полученные результаты показывают, что сегментированные Si/Ge нанонити могут быть перспективными для термоэлектрических применений.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку в рамках проекта для молодых ученых 12.819.05.18F (Республика Молдова).

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. A.A. Balandin, D.L. Nika. Phononics in low-dimensional materials // Materials Today.– 2012.– 15.– 266.
2. D.L. Nika et al. Reduction of the lattice thermal conductivity in one-dimensional quantum-dot superlattices due to phonon filtering // Phys. Rev. B.– 2011.– 84.– 165415.
3. D.L. Nika, N.D. Zincenco, E.P. Pokatilov. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures // J. Nanoelectron. Optoelectron.– 2009.– 4.– 180.
4. I. Ponomareva, D. Srivastava, M. Menon. Thermal conductivity in thin silicon nanowires: phonon confinement effect // Nano Lett.– 2007.– 7.– 1155.

C. I. Isacova, D. L. Nika

Thermal conductivity of Si/Ge segmented nanowires.

The authors have theoretically investigated the earlier predicted effect of the lattice thermal conductivity drop in segmented Si/Ge nanowires as compared to smooth silicon nanowires. The dependence of this effect on the cross-section area of segmented nanowires has been closely studied. The research has been conducted in the framework of the face-centered cubic lattice model.

Keywords: *silicon, segmented nanowires, phonons, thermal conductivity.*