

## ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ НАНОНИТЕЙ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ ОТ ИХ ГЕОМЕТРИИ И ФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАТЕРИАЛОВ

К. Я. Исакова, к. ф.-м. н. А. И. Кочемасов, д. ф.м. н. Д. Л. Ника

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

*Теоретически исследовано влияние на фоновые и теплопроводящие свойства нанонитей на базе кремния модуляции их поперечного сечения и добавления в них материалов с более низкой скоростью распространения звука. Было показано, что изменяя параметры сегментов и добавляя обкладки, можно достичь двух-семикратного уменьшения решеточной теплопроводности сегментированных нанонитей по сравнению с обычной нанонитью.*

*Ключевые слова:* фононы, теплопроводность, кремний, нанонить.

Известно, что теплопроводность в полупроводниковых наноматериалах ниже, чем в аналогичных объемных материалах [1, 2]. Это связано со снижением групповых скоростей из-за квантово-размерного эффекта для фононов, что приводит к уменьшению решеточной теплопроводности. Низкие значения решеточной теплопроводности нанонитей делают их перспективными для термоэлектрических и термоизоляционных применений. Одним из перспективных способов управления решеточной теплопроводностью является фоновая инженерия [3]. Фоновая инженерия особенно эффективна в наноструктурах, составленных из слоев или сегментов разной формы, разного размера и/или разных материалов.

Нами было изучено влияние геометрии нанонитей на базе кремния и физических параметров материалов на их фоновые свойства и решеточную теплопроводность. Были рассмотрены сегментированные нанонити на основе Si с постоянным и переменным поперечным сечением, а также в диэлектрических обкладках (рис. 1).

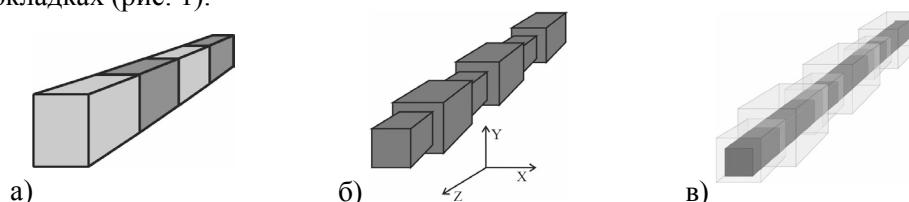


Рис. 1. Схема нанонити, составленной из сегментов различных материалов с одинаковым поперечным сечением (а) и с различным сечением (б), а также гладкой нити в обкладках переменного сечения (в)

Для расчета фононного спектра была использована динамическая модель колебаний гранецентрированной решетки. В рамках модели реальная решетка кремния представляется как гранецентрированная, но с удвоенной массой атомов в узлах. Частоты и векторы смещения фононных мод находились из следующей системы уравнений:

$$m\omega^2 w_i(\vec{n}; \vec{q}) = \sum_{j=1,2,3} \sum_{\vec{n}'} D_{ij}(\vec{n}, \vec{n}'; \vec{q}) w_j(\vec{n}'; \vec{q}), \quad (1)$$

где  $D_{ij} = \Phi_{ij}(\vec{n}, \vec{n}') \exp(i\vec{q} \times (\vec{n}' - \vec{n}))$  — компоненты динамической матрицы;  $w_i$  —  $i$ -й компонент атомного смещения;  $\omega$  — частота фононов;  $\vec{q}$  — волновой вектор;  $m$  — масса атомов.

Решеточная теплопроводность рассчитывалась по формуле

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

где  $s$  — число фоновых ветвей;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $\hbar$  — постоянная Планка;  $T$  — абсолютная температура;  $\tau_{tot,s}$  — полное время релаксации фононов, полученное согласно правилу Маттиссена. Значения времени релаксации для каждого из механизмов были взяты из [4].

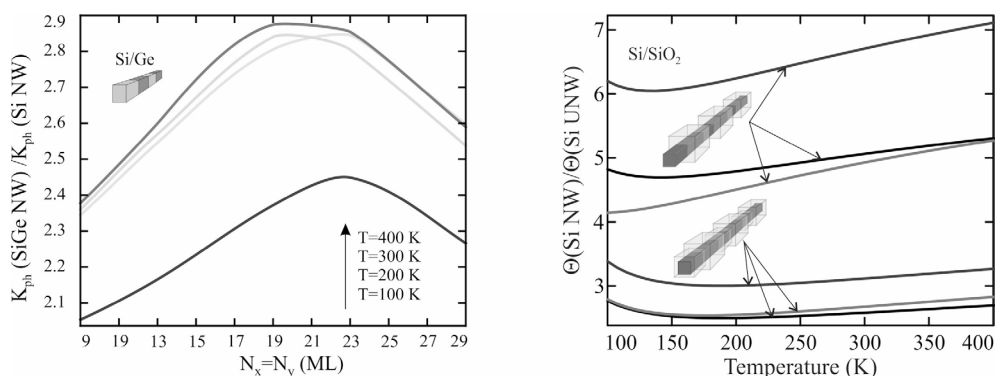


Рис. 2. Отношение теплопроводностей обычной Si-нанонити и сегментированной Si/Ge-нанонити в зависимости от ее поперечного сечения (а) и отношение тепловых потоков в гладкой Si-нанонити и в нанонити в диэлектрических обкладках Si/SiO<sub>2</sub> в зависимости от температуры (б)

Было установлено, что большое число фоновых мод оказываются захваченными сегментами нанонитей и исключаются из процессов теплового транспорта. В результате теплопроводность сегментированных нанонитей Si/Ge [5] и Si/SiO<sub>2</sub> [6] при  $T = 300\ K$  оказывается в 2—7 раз меньше (см. рис. 2), чем гладкой Si-нанонити. Было установлено, что модулирование поперечного сечения позволяет снизить теплопроводность по сравнению с гладкой нитью, причем как в однородной, так и сегментированной. Также была исследована зависимость падения теплопроводности от длины чередующихся сегментов. Полученные зависимости от различных факторов позволяют экспериментаторам прогнозировать фоновые и тепловые свойства получаемых наноструктур.

Работа выполнена при поддержке гранта 15.817.02.29F.

#### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Zou, J., Balandin, A. Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire // Journal of Applied Physics.— 2001.— Vol. 89.— P. 2932.
2. Zincenco, N., Nika, D., Pokatilov, E., et al. Acoustic phonon engineering of thermal properties of silicon-based nanostructures. // Journal of Physics: Conference Series.— 2007.— Vol. 92.— P. 012086-1—012086-4.
3. Balandin A., Nika D. Phononics in low-dimensional materials // Materials Today.— 2012.— Vol. 15.— P. 266—275.
4. Weber L. Gmelin, E. Transport properties of silicon // Applied Physics A.— 1991.— 53.— 136—140.
5. Исакова К. Падение фоновой теплопроводности в сегментированных Si/Ge нанонитях // Studia Universitatis Seria științe exacte și economice.— 2015.— Т. 2 (82).— 65—71.
6. Nika D. L., Cocemasov A. I., Isacova C. I. et al. Suppression of phonon heat conduction in cross-section modulated nanowires // Physical Review B.— 2012.— Vol. 85.— P. 205439-1—205439-10.

C. I. Isacova, A. I. Cocemasov, D. L. Nika

#### Dependence of thermal conductivity of segmented silicon-based nanowires on their geometry and physical parameters of the materials

*We investigated theoretically the influence of physical and geometric parameters on the phonon and thermal properties of Si-based nanowires. We studied the influence of cross-section modulation and of low sound velocity materials, added as claddings or as segments of the nanowire. It was demonstrated that segments parameters change leads to the suppression of the phonon thermal conduction (by a factor of 2 to 7) in comparison with generic silicon nanowires. Low values of the thermal conductivity of segmented nanowires make them prospective for thermoelectric and thermoinsulating applications.*

*Keywords: phonons, thermal conductivity, silicon, nanowire*