

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ, ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ СТРУКТУР Si/Ge МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Минск, Республика Беларусь

Белорусский государственный университет

Минск, Республика Беларусь

Хомец А.Л., Холяво И.И., Сафронов И.В. Мигас Д.Б.

В данной работе сравнивалась фононная составляющая теплопроводности многослойных, тонкопленочных структур на основе Si/Ge с различными ориентациями, различным количеством слоёв и различной толщиной слоёв Si и Ge, представленных на рисунке 1. Расчет проводился с помощью метода равновесной молекулярной динамики, реализованного в пакете LAMMPS. Формула Грина-Кубо ($\kappa_i = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle J_i(t) J_i(0) \rangle dt$) использовалась для вычисления коэффициентов фононной теплопроводности. Предварительные результаты исследований показывают, что при увеличении числа слоёв в перпендикулярном направлении имеет место рост теплопроводности, однако, возможно, зависимость будет нелинейной (рисунок 1). Коэффициенты теплопроводности вдоль слоёв в направлении {110} являются наибольшими по сравнению с направлением {001} (вдоль слоя) и {110} (перпендикулярной слоям), указывая таким образом на наличие анизотропии теплопроводности в многослойных, тонкопленочных структурах на основе Si/Ge.

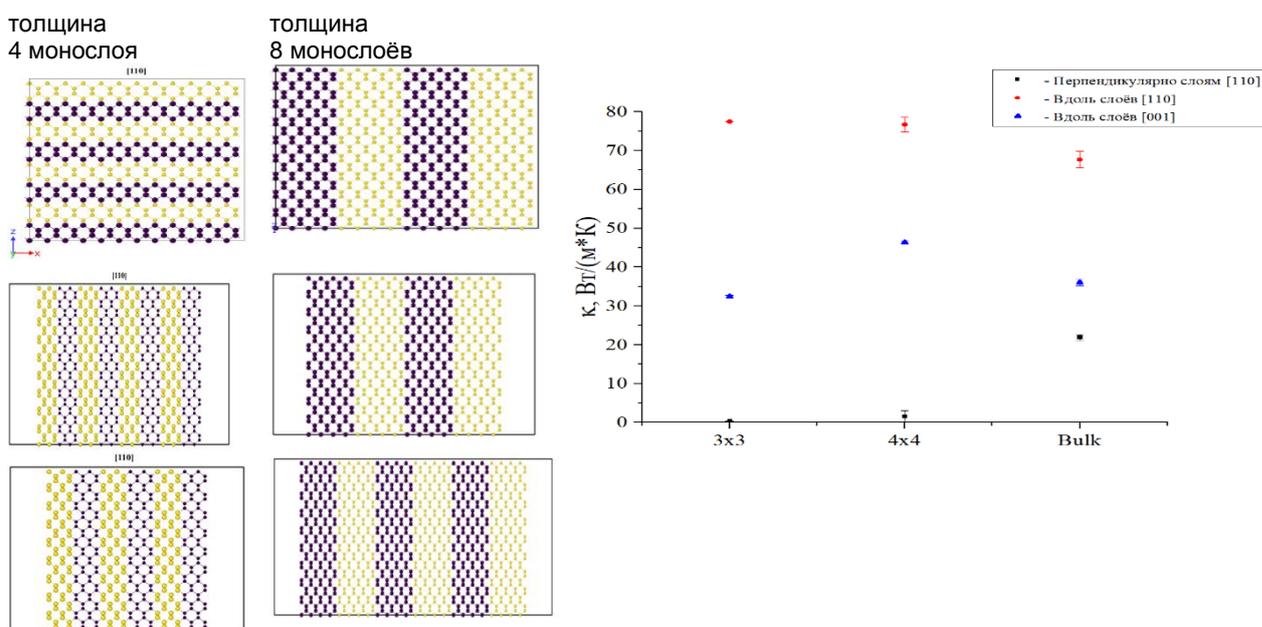


Рисунок 1. Структурные модели многослойных, тонкопленочных структур на основе Si/Ge с ориентацией {110} и различной толщиной (панель слева). Зависимость коэффициента теплопроводности данных наноструктур от размера слоев (панель справа).