

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

УДК 658.5.012.1

Самусевич
Иван Станиславович

Моделирование термоэлектрических свойств кремний – германиевых
наноразмерных шнуров

АВТОРЕФЕРАТ

магистерской диссертации на соискание степени
магистра технических наук

по специальности 1-41 81 03 «Нанотехнологии и
наноматериалы в электронике»

Научный руководитель
д-р.физ.-матем. наук, доцент
Мигас Д.Б.

Минск 2019

Работа выполнена на кафедре микро- и наноэлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Научный руководитель: **Мигас Дмитрий Борисович**,
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры микро- и
наноэлектроники учреждения образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

Рецензент: **Хмыль Александр Александрович**,
доктор технических наук, профессор
кафедры электронной техники и технологии
«Белорусский государственный
экономический университет»

Защита диссертации состоится «25» июня 2019 г. года в 9⁰⁰ часов на заседании Государственной комиссии по защите магистерских диссертаций в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г.Минск, ул. П.Бровки, 6, 1 уч. корп., ауд. 114, тел.: 293-89-26, e-mail: kafme@bsuir.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

ВВЕДЕНИЕ

Значительный прогресс в области технологий, в течение последних нескольких десятилетий, связан с достижениями в изучении различных наноструктур. Полупроводниковые нанопровода (англоязычный термин nanowire – нанопровод, нанонить, нанопроволока) представляют большой интерес из-за особых электрических и оптических свойств. Нанопроводы являются перспективными элементами электронных и оптоэлектронных приборов нового поколения, также немаловажной деталью является их совместимость с существующей кремниевой технологией.

Кремний в современной микро- и наноэлектронике является основным материалом, который используется для производства как дискретных элементов, так и сверхбольших интегральных микросхем. Кремниевая технология хорошо отработана, причём многие химические и физические процессы и явления, связанные с этой технологией, досконально изучены.

На сегодняшний день кремниевые нанопроводы успешно применены в качестве различных датчиков. В частности, можно указать датчики дезоксирибонуклеиновой кислоты, кислотности, глюкозы, влажности. Изготовлены солнечные элементы и наноструктуры для различных приборов на основе кремниевых нанопроводов. Логично представить кремниевые нанопроводы в виде канала полевого транзистора, причём рабочие характеристики такого транзистора оказались приемлемыми для промышленного использования.

Большой интерес нанопроводы кремния и германия имеют в области создания более эффективных способов преобразования энергии. Значительное внимание было обращено на твердотельные термоэлектрические преобразователи на их основе. Последние имеют ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами: простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надёжность.

Альтернативная энергетика уверенно замещает традиционную энергетика, основанную на использовании углеводородов, за счет увеличения эффективности преобразования и снижения стоимости преобразователей.

Однако сегодня обеспечиваемая термоэлектрическими устройствами эффективность преобразования ниже, чем у электрических генераторов, и поэтому они не получили широкого распространения в промышленности. В то же время имеется ряд областей применения, где их достоинства перевешивают их недостатки (пример – используются как источники электричества на космических аппаратах). Для по-настоящему широких промышленных применений термоэлектрических преобразователей энергии необходимо существенное повышение их эффективности.

Одним из возможных методов повышения эффективности термоэлектрических элементов является использование полупроводниковых

наношнуров с пространственно неоднородными дефектами в виде Si/Ge структур «ядро-оболочка». Граница раздела кремний-германий не приводит к образованию центров рассеяния для носителей заряда, но является барьером для распространения фононов. Это позволяет уменьшить вклад решеточной теплопроводности без уменьшения электропроводности, что, в свою очередь, увеличит эффективность термоэлектрического преобразования.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Получение и преобразование энергии — одно из важнейших направлений деятельности современной цивилизации, лежащее в самой основе её существования. Большое внимание было обращено в этой связи на твердотельные термоэлектрические преобразователи. Последние имеют ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами: простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надёжность, возможность миниатюризации без потери эффективности. Однако сегодня обеспечиваемая термоэлектрическими устройствами эффективность преобразования ниже, чем у электрических генераторов или холодильников обычной конструкции, и поэтому они не получили широкого распространения в промышленности. Объект, который в последнее время привлекает внимание с точки зрения его возможных термоэлектрических применений, — это полупроводниковые наношнуры.

Степень разработанности проблемы

В процессе работы созданы структурные модели полупроводниковых наношнуров Si/Ge с ориентациями роста $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$. Проведено исследование влияния морфологии поверхности на стабильность наношнуров кремния и германия, в результате, выделено наиболее стабильная морфология с ориентацией роста $\langle 011 \rangle$. Для исследуемых наношнуров кремния/германия с структуров «ядро – оболочка» обнаружены две отличающиеся закономерности изменения коэффициента теплопроводности от соотношения объемного содержания ядра и оболочки в зависимости от типа материала ядра. В случае структуры Si-ядро/Ge-оболочка при увеличении объемного содержания ядра f_{core} имеется немонотонная зависимость с наличием минимума, лежащим ниже значения TC для наношнура из чистого Ge (11,4 Вт/(м·К)), а в случае структуры Ge-ядро Si-оболочка — монотонное понижение с 19,1 (для NW из чистого Si) до 11,4 Вт/(м·К).

Цель и задачи исследования

Цель состоит в установлении взаимосвязи между морфологией Si/Ge наношнуров и коэффициента теплопроводности. Для достижения поставленной цели требуется решить **следующие задачи**:

- произвести анализ состояния исследований о использовании наношнуров для термоэлектрического преобразования

энергии

- выбрать и обосновать методы и методики моделирования переноса тепла в полупроводниковых наноструктурах
- провести моделирование коэффициента теплопроводности в Si/Ge наноструктурах с учетом пространственно неоднородных дефектов.

Объектом исследования являются полупроводниковые наноструктуры кремния и германия с пространственно неоднородными дефектами.

Предметом исследования является взаимосвязь между морфологией наноструктур Si/Ge и их коэффициентом теплопроводности.

Область исследования. Содержание диссертационной работы соответствует образовательному стандарту высшего образования второй ступени (магистратуры) специальности 1-41 81 03 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике».

Информационная база для исследования коэффициента теплопроводности полупроводниковых наноструктур Si/Ge сформирована на основе известных экспериментальных и теоретических данных.

Научная новизна диссертационной работы заключается в поиске оптимальной морфологии наноструктур, обладающих минимальным коэффициентом теплопроводности.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Наноструктуры кремния и германия на основе гетероструктур типа ядро-оболочка (Si-ядро, Ge-оболочка) при объемном содержании ядра $\sim 25\%$ (2,5 нм) обладают минимумом решеточной теплопроводности, равным 9,6 Вт/(м·К), в то время как значения для наноструктур из чистого Si и Ge составляют 19,1 и 11,4 Вт/(м·К).

Теоретическая значимость заключается в том, что предложен подход численному моделированию коэффициента теплопроводности наноструктур с учетом пространственно неоднородных дефектов.

Практическая значимость состоит в установлении необходимой морфологии кремний - германиевых наноструктур с наличием пространственно неоднородных дефектов, имеющих минимальный коэффициент теплопроводности, что необходимо для их использования в производстве эффективных преобразователей.

Апробация и внедрение результатов исследования

Результаты исследования были представлены на Международной конференции «Материалы и структуры современной электроники», Минск БГУ – 2018; 55 научная конференция БГУИР.

Публикации

Основные положения работы и результаты диссертации изложены в двух опубликованных работах общим объемом 4,0 п.л. (авторский объем 4,5 п.л.).

Структура и объем работы. Структура диссертационной работы обусловлена целью, задачами и логикой исследования. Работа состоит из

введения, четырех глав и заключения, библиографического списка. Общий объем диссертации – 63 страницы. Работа содержит 23 рисунка. Библиографический список включает 74 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** рассмотрено современное состояние проблемы, определены основные направления исследований. Представлено общее описание подхода повышения эффективности термоэлектрического преобразования.

В **первой главе** представлен обзор методов получения полупроводниковых нанопроводов. Описываются различные механизмы роста низкоразмерных проводов, приводятся результаты экспериментальных исследований о механизмах роста.

Во **второй главе** рассмотрена физика процесса термоэлектрического преобразования, введен термин термоэлектрическая добротность, установлены общие принципы повышения эффективности термоэлектрического преобразования.

В **третьей главе** представлен обзор метода молекулярной динамики для моделирования многочастичных систем с учетом распространения тепла. Рассмотрены основные положения метода молекулярной динамики, рассмотрен общий алгоритм моделирования многочастичной системы. Определены ограничения метода.

В **четвертой главе** описан процесс создания структурных моделей Si/Ge нанопроводов с ориентациями роста $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$. Проведен анализ зависимости стабильности полупроводниковых нанопроводов кремния и германия от морфологии поверхности. На основе результатов анализа выявлена наиболее стабильная (в диапазоне диаметров до 10 нм) морфология поверхности с ориентацией роста $\langle 011 \rangle$. Для нанопроводов с данной морфологией проведено моделирование теплопроводности и установлена связь между наличием пространственно неоднородных дефектов и значением коэффициента теплопроводности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование морфологии нанопроводов кремния и германия с различными ориентациями и сечениями. Для $\langle 011 \rangle$ -ориентированных нанопроводов, являющихся наиболее стабильными при их диаметрах менее 10 нм, рассчитаны коэффициент теплопроводности с помощью метода неравновесной молекулярной динамики. В качестве наиболее оптимального пространственно-неоднородного дефекта, с точки

зрения экспериментального воплощения, является структура ядро-оболочка, в которой появляется эффективная граница раздела. На этой границе раздела рассеиваются фононы без возникновения центров рассеяния носителей заряда из-за отсутствие оборванных связей, которые могли бы привести к образованию ловушек, заряженных и нейтральных центров рассеяния. Варьируя объемное содержание кремния и германия в нанопроволоке типа ядро-оболочка удалось уменьшить значение коэффициента теплопроводности по сравнению с нанопроволочками кремния и германия. Наиболее оптимальной конфигурацией оказался нанопроволока Si/Ge с кремниевым ядром и германиевой оболочкой, для которого значение рассчитанного коэффициента теплопроводности оказалось 9,6 Вт/(м·К) при объемном содержании ядра ~ 25%, в то время как значения для нанопроволок из чистого Si и Ge составляют 19,1 и 11,4 Вт/(м·К). Следующим возможным шагом для дальнейшего уменьшения коэффициента теплопроводности может оказаться структура, где кремниевые и германиевые сегменты формируются вдоль оси нанопроволоки, что также технологически возможно. При этом создается дополнительный центр рассеяния фононов. Еще одной возможностью может быть создание слоев SiGe между областями кремния и германия, которые приносят дополнительный барьер для прохождения фононов.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. И. С. Самусевич, Д. А. Шохонов, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас Влияние морфологии на стабильность нанопроволок кремния и германия / Материалы и структуры современной электроники, Минск: БГУ, 2018.
2. И. С. Самусевич Влияние морфологии поверхности на стабильность нанопроволок кремния / 55 – я Юбилейная научная конференция аспирантов, магистрантов и студентов, Минск: БГУИР, 2019.