

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

УДК [620.3:661.8'046.1]-026.657

Холяво
Иван Иванович

Теплопроводность нанопроводов из арсенида галлия (GaAs)

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра технических наук
по специальности 1-41 80 03 «Нанотехнологии и наноматериалы в
электронике»

Научный руководитель
Мигас Дмитрий Борисович
Доктор физико-математических наук,
Доцент

Минск 2020

ВВЕДЕНИЕ

Сильная зависимость человеческого общества от ископаемого топлива привела к глобальному изменению климата. Почти 90% всей энергии все еще зависит от ископаемых источников и энергетический спрос будет расти. Более того, примерно 70% энергии потребления ископаемых видов топлива было потрачено впустую в виде тепла двигателей и системами фабрик. В транспортных средствах двигатели внутреннего сгорания очень неэффективно используют энергию, потребляя только 20-25 % энергии, произведенной в результате сгорания топлива. Также существуют проблемы с электропитанием космических аппаратов, предназначенных для исследования удаленных от Солнца регионов Солнечной системы, где солнечные элементы становятся малоэффективными. Следовательно, нужно искать альтернативные источники энергии или искать решения повышения роста энергетической эффективности ископаемых источников энергии.

Большое внимание было обращено в этой связи на твердотельные термоэлектрические преобразователи. Они имеют ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами: простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надежность, возможность миниатюризации без потери эффективности. Они используются и в экологически чистых холодильных агрегатах, поскольку преобразование энергии с их помощью возможно в обоих направлениях.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы магистерской диссертации. Тепло непрерывно теряется в окружающую среду в виде тепловой энергии из-за ограниченной эффективности (30% - 40%) тепловых двигателей, в основном из-за выработки электроэнергии и транспортировки. Термоэлектрический эффект обеспечивает способ преобразования этой потерянной тепловой энергии в полезную электрическую энергию, что может привести к экономии топлива и сокращению выбросов парниковых газов. Термоэлектрические генераторы являются компактными, прочными, бесшумными и надежными, поскольку не содержат движущихся частей. Современные применения ограничены, потому что эффективность термоэлектрических материалов все еще довольно низка. Теоретические работы и лабораторные образцы в последнее десятилетие показали потенциал для значительного улучшения термоэлектрических характеристик при использовании наноструктурированных материалов, таких как наношнуров. Использование наношнуров может позволить создать термоэлектрические материалы нового поколения с более высокой эффективностью.

Цели и задачи исследования. Целью магистерской диссертации является исследование влияния морфологий наношнуров арсенида галлия на коэффициент решеточной составляющей теплопроводности.

Для достижения цели, поставленной в данной магистерской диссертации, необходимо решить следующие задачи:

- Провести анализ существующих типов структур на основе соединений группы $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$;
- Осуществить генерацию структур наношнуров арсенида галлия и арсенида индия с различной морфологией;
- Осуществить расчет коэффициента решеточной составляющей теплопроводности наношнуров арсенида галлия и арсенида индия, используя метод неравновесной молекулярной динамики;
- Провести анализ полученных результатов и сделать заключение об эффективности использования конкретных типов структур и морфологий в качестве материалов для прямого преобразования тепловой энергии в электрическую.

Объектом исследования являются наношнуров арсенида галлия и арсенида индия со структурой цинковой обманки и вюрцита с определенными морфологиями.

Предметом исследования является решеточная теплопроводность нанопроволок арсенида галлия и арсенида индия со структурой цинковой обманки и вюрцита.

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

Научная новизна диссертационной работы заключается в использовании нанопроволок арсенида галлия и арсенида индия с различной морфологией для уменьшения коэффициента решеточной составляющей теплопроводности за счет рассеяния фононов на поверхности.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Нанопроволоки арсенида галлия с диаметром 2,5 нм и кристаллографической ориентацией $\langle 111 \rangle$ со структурой цинковой обманки с большими гранями $\{112\}$ и малыми гранями $\{011\}$ на поверхности обладают значениями коэффициента решеточной составляющей теплопроводности 2.6 Вт/(м·К), что значительно меньше соответствующего значения для объемного материала (55 Вт/(м·К)).

Личный вклад магистранта заключается в проведении анализа литературы, генерации нанопроволок арсенида галлия и арсенида индия со структурами цинковой обманки и вюрцита с разной морфологией и расчете коэффициента теплопроводности.

Апробация и внедрение результатов исследования

Результаты исследования были представлены на конференциях: VIII международная научная конференция, Минск, 10-12 октября 2018 г. БГУ, 55-я научная конференция аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 22-26 апреля 2019 г. БГУИР, 56-я научная конференция аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 20 мая 2020 г. БГУИР.

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 – 72 страницы. Работа содержит 9 таблиц, 54 рисунка. Библиографический список включает 57 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** описано современное состояние проблемы термоэлектрических материалов, в частности их низкой эффективности; определены основные направления исследования, а также дается обоснование актуальности темы диссертационной работы.

В **общей характеристике работы** сформулированы цели и задачи диссертационной работы, даны сведения об объекте исследования и обоснован его выбор, представлено положение, выносимое на защиту, приведены сведения об апробации результатов диссертационной работы.

В **первой** главе рассматриваются общие сведения о термоэлектрической добротности и о нанопрутах. Описаны методы уменьшения коэффициента теплопроводности.

Во **второй** главе описан метод молекулярной динамики, с помощью которого была рассчитана решеточная составляющая теплопроводности в данной диссертационной работе.

В **третьей** главе описана экспериментальная часть магистерской диссертации. Представлены полученные результаты, а также проведен их анализ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения диссертационной работы было проведено теоретическое исследование влияния морфологии поверхности на решеточную теплопроводность нанопроволок GaAs и InAs методом неравновесной молекулярной динамики.

Установлены наиболее стабильные морфологии нанопроволок GaAs и InAs, обладающие наименьшей полной энергией: структура вюрцита с большими гранями $\{011\}$ и малыми гранями $\{112\}$ на поверхности, структура вюрцита с большими гранями $\{112\}$ и малыми гранями $\{011\}$ на поверхности, структура цинковой обманки с большими гранями $\{011\}$ и малыми гранями $\{112\}$ на поверхности и структура цинковой обманки с большими гранями $\{112\}$ и малыми гранями $\{011\}$ на поверхности.

Также установлено, что нанопроволок со структурой вюрцита на гранях имеют меньшую плотность атомов с оборванными связями по сравнению с нанопроволками со структурой цинковой обманки, поэтому нанопроволок со структурой вюрцита оказались более стабильны.

Выявлено, что наименьшим значением коэффициента теплопроводности (т.е. наиболее оптимальной структурой для применения в твердотельных термоэлектрических преобразователях) для нанопроволок оказалась структура цинковой обманки с большими гранями $\{112\}$ и малыми гранями $\{011\}$ на поверхности. Малые реконструированные грани $\{011\}$ на поверхности позволяли избавиться от поверхностных атомов на кромках между $\{112\}$ гранями. Значение коэффициента теплопроводности составила 2,6 Вт/(м·К). Было установлено, что на решеточную теплопроводность влияет диаметр нанопроволок. При меньших диаметрах нанопроволок происходит уменьшение теплопроводности из-за существенного влияния рассеяния на боковых стенках.

Полученные результаты могут быть использованы для проектирования приборов нанoeлектроники, усовершенствования уже существующих устройств на их основе, а также дальнейшего исследования фундаментальных свойств таких наноструктур.

Качественное и количественное соответствие результатов теоретического моделирования и эксперимента говорит о правильности выбранной модели.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Холяво И.И. Влияние морфологии на стабильность нанопроводов арсенида галлия / И. И. Холяво, А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Материалы и структуры современной электроники : материалы VIII Междунар. науч. конф., Минск, 10–12 окт. 2018 г. / редкол.: В. Б. Оджаяев (отв. ред.) [и др.]. – Минск : БГУ, 2018. – С. 313–317.

2. Холяво И.И. Исследование теплопроводности нанопроводов Si/Ge с архитектурой ядро-оболочка и ориентацией $\langle 011 \rangle$ / И. И. Холяво, А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Радиотехника и электроника: материалы 55-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 22 - 26 апреля 2019 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. - Минск, 2019.

3. Холяво И.И. Исследование теплопроводности $\langle 011 \rangle$ -ориентированных нанопроводов Si/Ge со структурами типа ядро-оболочка и сегментного типа / И. И. Холяво, А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, Д. Б. Мигас // Радиотехника и электроника: материалы 56-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 20 мая 2020 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. - Минск, 2020.