

# Влияние морфологии на фононную теплопроводность нанопроволок Si, Ge и Si/Ge типа ядро/оболочка

© И.И. Холяво<sup>1</sup>, А.Л. Хомец<sup>1</sup>, И.В. Сафронов<sup>2</sup>, А.Б. Филонов<sup>1</sup>, Д.Б. Мигас<sup>1,3,¶</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220089 Минск, Беларусь

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

<sup>3</sup> Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, 115409 Москва, Россия

¶ E-mail: migas@bsuir.by

Поступила в Редакцию 1 декабря 2021 г.

В окончательной редакции 2 марта 2022 г.

Принята к публикации 21 марта 2022 г.

Для термоэлектрических применений полупроводниковых нанопроволок дополнительным фактором понижения их теплопроводности является изменение морфологии. В данной работе для нанопроволок Si, Ge, а также Si/Ge типа ядро/оболочка методом неравновесной молекулярной динамики исследовано влияние объемной доли и типа материала ядра на теплопроводность при 300 К. Принимались во внимание нанопроволоки с экспериментально наблюдаемыми  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  ориентациями и различными сечениями. Обнаружено, что для  $\langle 112 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка при объемной доле ядра  $\sim 30\%$  теплопроводность является наименьшей (5.76 Вт/(м·К)), в то время как значения теплопроводности для нанопроволок из чистого Si и Ge составляют 13.8 и 8.21 Вт/(м·К) соответственно.

**Ключевые слова:** нанопроволока, структура ядро/оболочка, морфология, кремний, германий, теплопроводность, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/FTP.2022.06.52593.9780

## 1. Введение

Преобразование тепла, исходящего от любого горячего источника, такого как Солнце, двигателя или котла, непосредственно в электричество лежит в основе термоэлектрических устройств [1]. Эффективность термоэлектрического преобразования энергии определяется безразмерной величиной  $ZT$  или термоэлектрической добротностью, определяемой как  $S^2\sigma T/(\kappa_L + \kappa_e)$ , где  $S$ ,  $\sigma$ ,  $T$  и  $\kappa_L$ ,  $\kappa_e$  — соответственно коэффициенты термоэдс (Зеебека), электропроводности, рабочая температура и коэффициенты теплопроводности (фононная/решеточная и электронная составляющие) [2]. Увеличение электропроводности сопровождается не только ростом электронной теплопроводности, но обычно и падением термоэдс, так что оптимизировать результирующую величину  $ZT$  оказывается достаточно сложно [2,3].

На сегодняшний день эффективность термоэлектрических генераторов несоизмерима с другими альтернативными источниками энергии, такими как солнечные и топливные элементы [4]. По этой причине по-прежнему актуальной задачей является повышение  $ZT$  термоэлектрических материалов от 3 и более [2]. При этом разработка нетоксичных и недорогих термоэлектрических материалов рассматривается как ключевая цель для будущих коммерческих применений: были исследованы многие перспективные термоэлектрические материалы, например, на основе Cu, бессвинцовый SnTe, а также Si и Ge [4]. Последние два из них представляют особый

интерес, так как образуют основу хорошо разработанной кремниевой технологии. Однако вследствие высоких значений теплопроводности традиционные объемный Si и Ge (130–150 Вт/(м·К) [5] и 50–60 Вт/(м·К) [6] соответственно, при 300 К) имеют низкую термоэлектрическую эффективность.

В настоящее время особое внимание обращено на низкоразмерные полупроводниковые материалы, такие как полупроводниковые нанопроволоки (1D), благодаря их низкой теплопроводности [7–9] и достаточно высокой подвижности носителей заряда [10,11]. В случае нанопроволок Si установлена значительная анизотропия тепловой проводимости в зависимости от направления роста структуры, при этом самая низкая тепловая проводимость свойственна для ориентации  $\langle 111 \rangle$  по сравнению с ориентациями  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  [12]. Существенное влияние поверхностной ориентации на тепловой транспорт в  $\langle 100 \rangle$ -ориентированных нанопроволоках Si квадратного сечения было продемонстрировано в работе [13], в случае наличия  $\{110\}$  граней теплопроводность является наибольшей, а в случае  $\{170\}$  граней — наименьшей. Численные оценки теплопроводности для  $\langle 100 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si и Ge ( $\sim 20$  и  $\sim 10$  Вт/(м·К) соответственно [14]) оказались почти на порядок меньше, чем для объемных материалов. Такое уменьшение может происходить благодаря рассеянию фононов от поверхности наноструктур (при диаметрах, меньших длины свободного пробега фононов в однородном материале). Можно добиться дополнитель-

ного рассеяния фононов на границе раздела в слоистых структурах или в структурах типа ядро/оболочка. Было показано, что нанопроволоки Si/Ge типа ядро/оболочка могут быть получены методом химического осаждения из газовой фазы при изменении режимов синтеза путем блокировки аксиального роста и активации радиального роста [15].

В литературе в качестве объекта моделирования с помощью метода молекулярной динамики в основном рассматривались  $\langle 100 \rangle$ -ориентированные нанопроволоки Si/Ge типа ядро/оболочка с круглым [14,16] и квадратным [14,17,18] поперечными сечениями. Для нанопроволок Si/Ge с квадратным сечением использовались либо  $\{100\}$  [14,18], либо  $\{110\}$  грани [17]. В случае круглого сечения на поверхности грани не формировали [14,16]. Результаты работы [14] показывают, что  $\kappa_L$  нанопроволок с квадратным сечением ниже, чем с круглым. Исследование теплового транспорта в  $\langle 110 \rangle$  Si нанопроволоках с квадратным и круглым сечениями (грани не указаны), а также с пентагональным сечением (только в случае формирования двойников внутри нанопроволоки) показало, что  $\kappa_L$  может отличаться в 3 раза, причем его наименьшие значения достигаются в случае пентагонального сечения [19]. Для  $\langle 111 \rangle$  Si нанопроволок с пилообразной морфологией поверхности (грани на поверхности не параллельны оси нанопроволоки) с  $\{111\}$  и  $\{113\}$  гранями либо с  $\{111\}$  и  $\{100\}$  гранями обнаружено уменьшение  $\kappa_L$  на 13% либо на 33% по сравнению с нанопроволоками Si с тем же поперечным размером и с  $\{112\}$  гранями [20]. В исследовании влияния плотности двойников на теплопроводность  $\langle 112 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si с квадратным сечением и  $\{111\}$ ,  $\{110\}$  гранями установлена независимость данного эффекта от фонон-поверхностного рассеяния в нанопроволоках с и без данных дефектов, т.е. влияние определяется фонон-интерфейсным рассеянием как в массиве с двойниками [21].

С помощью методов молекулярной динамики и сильной связи при оценке  $ZT$  для  $\langle 110 \rangle$ - и  $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si и Ge-ядро/Si-оболочка с  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  и  $\{111\}$  гранями (для  $\langle 110 \rangle$  ориентации) и с  $\{110\}$  гранями (для  $\langle 111 \rangle$  ориентации) установлена возможность достичь значений  $> 2$  в случае значительной шероховатости поверхности [22]. Причем для устранения оборванных связей на поверхности нанопроволок проводилась пассивация водородом. Аналогичная морфология поверхности применялась в работе [23] при исследовании термоэлектрических свойств с учетом только электронной составляющей теплопроводности  $\langle 110 \rangle$  Ge-ядро/Si-оболочка нанопроволок с помощью метода из первых принципов и с учетом кинетического уравнения Больцмана. Выявлено, что пассивация водородом оборванных связей на поверхности приводит к увеличению  $ZT$  в 2 раза при 300 К по сравнению с вариантом совместной  $(2 \times 1)$  реконструкции и пассивации поверхностей нанопроволок Ge-ядро/Si-оболочка [23].

Учитывая отсутствие данных, полученных одним методом, для нанопроволок Si, Ge и нанопроволок Si/Ge ти-

па ядро/оболочка сложно оценить влияние морфологии на их теплопроводность. Так как фонон-поверхностное и фонон-интерфейсное рассеяние непосредственно зависят от определенной ориентации поверхности [24–26] и границы раздела [14,17,18], то корректный учет морфологии наноструктур позволит более точно теоретически предсказывать их термоэлектрические свойства. Таким образом, цель данной работы заключается в исследовании влияния морфологии на фононную теплопроводность нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка в сравнении с нанопроволоками Si и Ge, имеющими экспериментально наблюдаемые  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  направления роста.

## 2. Материалы и методы

В работе рассматривались  $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ -,  $\langle 111 \rangle$ - и  $\langle 112 \rangle$ -ориентированные нанопроволоки Si и Ge, а также Si/Ge типа ядро/оболочка (Si-ядро/Ge-оболочка и Ge-ядро/Si-оболочка) с резкими границами раздела (без учета взаимодиффузии Si и Ge). Для всех нанопроволок был выбран диаметр  $\sim 5.5$  нм, что позволяло варьировать поперечные размеры ядра и оболочки в пределах нескольких нм. Морфология поверхности нанопроволок выбиралась на основании результатов, полученных с помощью первопринципных методов расчета [27,28]: для  $\langle 100 \rangle$  ориентации использовались  $\{100\}$  и  $\{110\}$  грани, для  $\langle 110 \rangle$  ориентации —  $\{100\}$ ,  $\{100\}$  и  $\{111\}$  грани, для  $\langle 111 \rangle$  ориентации —  $\{110\}$  и  $\{112\}$  грани и для  $\langle 112 \rangle$  ориентации —  $\{110\}$ ,  $\{111\}$  и  $\{113\}$  грани. Также для граней  $\{100\}$ ,  $\{112\}$  и  $\{113\}$  проводилась реконструкция поверхности путем создания димеров [27,28]. Форма сечения ядра и нанопроволоки совпадали.

Полная энергия исследуемых нанопроволок минимизировалась методом молекулярной статистики, реализованным в программном пакете LAMMPS [29], с учетом релаксации и оптимизации геометрии атомной структуры с переменной суперъячейкой. Использовались трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором  $\sim 20$  нм в плоскости поперечного сечения нанопроволок. Межатомное взаимодействие для Si-Ge-системы описывалось с помощью потенциала Терсоффа [30]. Данный потенциал был ранее применен для моделирования теплопроводности нанопроволок Si/Ge [14,16].

Для моделирования фононной составляющей теплопроводности применялся метод неравновесной молекулярной динамики, реализованный в программном пакете LAMMPS [29]. Временной шаг задавался равным 1 фс. На первом этапе моделирования структуры приводились в термодинамическое равновесие с помощью изобарно-изотермического и канонического ансамблей в течение 0.1 нс каждый при температуре  $T = 300$  К. На втором этапе моделирования для установления термодинамического равновесия использовался микроканонический ансамбль в течение 1 нс. Для контроля и поддержания температуры в слоях применялись термостаты Ланже-

вена, при этом вводились соответствующие демпфирующие коэффициенты, влияющие на время релаксации во время колебаний, вследствие различия масс атомов. Для Ge этот коэффициент равен 1.0, а для Si равен отношению атомных масс Ge и Si ( $\sim 2.586$ ), что соответствует большей частоте колебаний более легкого атома. Для создания градиента температур в структурах устанавливались два термостата: холодный ( $T = 290$  К) и горячий ( $T = 310$  К) на расстоянии половины размера суперъчейки в направлении распространения теплового потока. Для уменьшения флуктуаций температуры в области термостата число атомов примерно равнялось  $\sim 4464$  (толщина  $\sim 4.1$  нм). Следует учитывать, что при использовании метода неравновесной молекулярной динамики, рассчитываемый коэффициент теплопроводности зависит от размера суперъчейки, вдоль которой происходит распространение теплового потока, когда размер суперъчейки меньше или соизмерим со средней длиной свободного пробега фононов при данной температуре. Часто встречаемая недооценка (занижение) значений теплопроводности устраняется путем увеличения размера суперъчейки, что требует слишком больших вычислительных затрат, однако не оказывает существенного влияния на тенденции изменения теплопроводности. Считается, что для использования закона Фурье необходимо достичь режима линейного отклика между обратными величинами теплопроводности и длины суперъчейки. Согласно выводам авторов работы [31], например, для кристалла Si обратная величина теплопроводности становится линейно зависимой от обратной длины суперъчейки, когда последняя достигает размеров  $> 100$  нм. Учитывая, что средняя длина свободного пробега фононов (отношение теплопроводности к теплоемкости и средней скорости фононов) в кристалле Ge будет меньше, чем для Si ( $\sim 300$  нм [32]), то режим линейного отклика также должен выполняться в этом случае при выбранном размере суперъчейки. На основании этих выводов длина ( $L$ ) всех рассматриваемых нанопроволок Si/Ge была выбрана равной  $\sim 100$  нм. Коэффициент теплопроводности ( $\kappa_L$ ) вдоль оси нанопроволок определялся из закона Фурье:

$$\kappa_L = -\frac{E}{2S_{\text{sec}}t(dT/dz)},$$

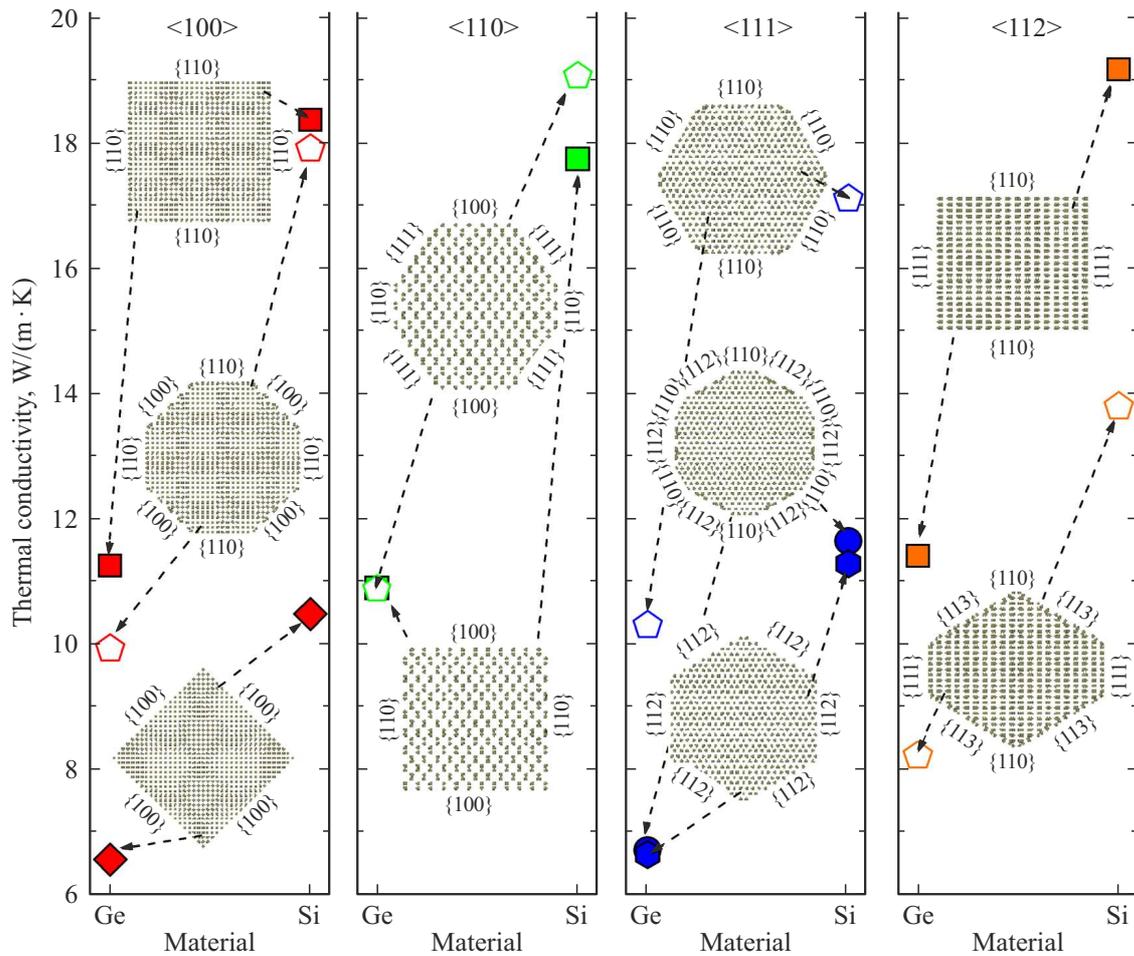
где  $E$  — перенесенная тепловая энергия; 2 — коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях, вследствие периодических граничных условий;  $t$  — время моделирования;  $S_{\text{sec}}$  — площадь поперечного сечения;  $dT/dz$  — градиент температуры в продольном направлении. Площадь поперечного сечения оценивалась через отношение объема нанопроволоки к его высоте. Объем нанопроволоки оценивался в свою очередь через сумму атомных объемов.

### 3. Результаты и обсуждение

Использование наноструктур с границами раздела Si/Ge, таких как многослойные тонкие пленки или нанопроволоки типа ядро/оболочка, не всегда может приводить к уменьшению  $\kappa_L$ , как было показано для тонких пленок Si/Ge [33]. Появление границы раздела Si/Ge неизбежно приводит к возникновению дополнительного механизма рассеяния фононов. Однако добавляется и слой Si, имеющий значительно больший  $\kappa_L$  по сравнению со слоем Ge [33]. Только проведение моделирования переноса тепла поможет корректно предсказать изменение  $\kappa_L$  в наноструктурах с различными поверхностями и границами раздела Si/Ge.

На первом этапе была исследована теплопроводность нанопроволок Ge и Si с различной ориентацией и морфологией поверхности (рис. 1). Результаты расчетов для ориентаций  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  отчетливо показывают, что изменение значений  $\kappa_L$  в зависимости от морфологии может варьироваться соответственно на  $\sim 42\%$  ( $4.7$  Вт/(м·К)),  $\sim 0.2\%$  ( $0.02$  Вт/(м·К)),  $\sim 35\%$  ( $3.6$  Вт/(м·К)) и  $\sim 28\%$  ( $3.2$  Вт/(м·К)) в случае нанопроволок Ge и  $\sim 43\%$  ( $7.9$  Вт/(м·К)),  $\sim 7\%$  ( $1.3$  Вт/(м·К)),  $\sim 34\%$  ( $5.8$  Вт/(м·К)) и  $\sim 28\%$  ( $5.4$  Вт/(м·К)) в случае нанопроволок Si. Данный эффект может быть обусловлен различным вкладом поверхностей в рассеяние фононов. Действительно, как было показано для тонких пленок Si [25], поверхность Si(100) наиболее интенсивно рассеивает фононы по сравнению с другими поверхностями, также это свойственно и для нанопроволок Si [13,20]. В нашем случае именно  $\langle 100 \rangle$ -ориентированные нанопроволоки Si и Ge с  $\{100\}$  гранями на поверхности обладают наименьшими значениями  $\kappa_L$  (рис. 1). Также очевидно, что для  $\{112\}$  и  $\{113\}$  граней свойственно эффективное рассеяние фононов (ориентации  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$ ). С другой стороны, появление  $\{110\}$  и  $\{111\}$  граней приводит к увеличению  $\kappa_L$ .

Так как потенциал Терсоффа не позволяет описывать перераспределение электронной плотности и электронных эффектов, связанных с реконструкцией поверхностных атомов, то исследование  $\kappa_L$  нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка следует проводить с учетом морфологий (см. вставки на рис. 2), предсказанных на основе результатов расчетов стабильности нанопроволок методами из первых принципов [27,28]. Второй этап наших исследований заключался в проведении моделирования  $\kappa_L$   $\langle 100 \rangle$ -,  $\langle 110 \rangle$ -,  $\langle 111 \rangle$ -,  $\langle 112 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка от объемной доли и типа материала ядра (рис. 2). Следует напомнить, что рассчитанные значения  $\kappa_L$  для нанопроволок из чистого Ge и Si варьируются соответственно от  $\sim 8$  до  $\sim 11$  Вт/(м·К) и от  $\sim 14$  до  $\sim 19$  Вт/(м·К), что почти на порядок ниже, чем для объемного Ge ( $50$ – $60$  Вт/(м·К) [6]) и Si ( $130$ – $150$  Вт/(м·К) [5]) вследствие интенсивного фонон-поверхностного рассеяния. Наименьшее значение теплопроводности достигается в

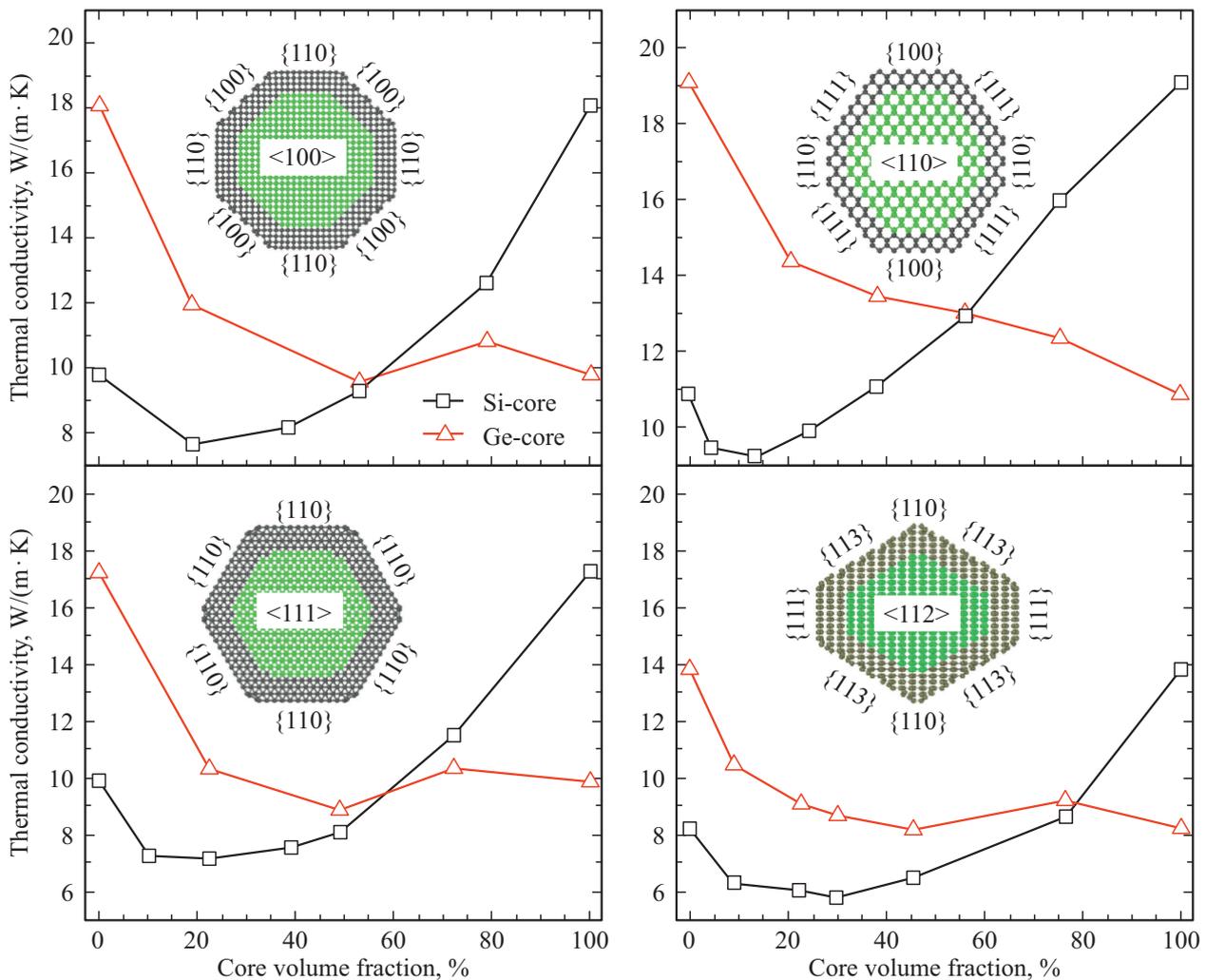


**Рис. 1.** Зависимость теплопроводности нанопроволок Ge и Si с различной ориентацией и морфологией. Соответствующие ориентации и грани обозначены, значения  $\kappa_L$  для каждой структуры показаны стрелкой.

случае структуры Si-ядро/Ge-оболочка, когда объемная доля Si-ядра составляет  $\sim 10\text{--}30\%$ . Причем значение теплопроводности в таких нанопроволоках ниже, чем у нанопроволок Si и Ge (рис. 2). Подобные тенденции изменения  $\kappa_L$  для  $\langle 100 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка с квадратным и круглым поперечными сечениями уже были обнаружены в работах [14,16]. Так, минимальное значение теплопроводности нанопроволок с квадратным поперечным сечением и объемной долей Si-ядра  $\sim 7.4\%$  составило  $\sim 8 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ , а с круглым поперечным сечением  $\sim 9.5 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$  при объемной доле Si-ядра  $\sim 40\%$  [14], что близко к значениям, представленным на рис. 2. Полученные результаты также качественно согласуются с результатами более ранних исследований [17], в которых показано значительное уменьшение  $\kappa_L$  для  $\langle 100 \rangle$ -ориентированных Si нанопроволок с квадратным поперечным сечением в случае покрытия их Ge-оболочкой толщиной 1–2 периода решетки. Также установлена отчетливая тенденция изменения теплопроводности относительно направления роста:  $\kappa_L^{(110)} > \kappa_L^{(100)} > \kappa_L^{(111)} > \kappa_L^{(112)}$ . Например, в окрестности минимума для структуры Si-ядро/Ge-оболочка

эти значения равны соответственно 9.22, 7.62, 7.18 и 5.76 Вт/(м·К), а для нанопроволок Si — 19.0, 17.9, 17.1, 13.8 Вт/(м·К).

Полученные зависимости на рис. 2 можно объяснить несколькими причинами [14], вдобавок к фоновому поверхностному рассеянию это: различие теплопроводности для Si и Ge, влияние рассеяния фононов продольными границами раздела Si/Ge и возникновение когерентного фононного резонанса. Появление когерентного фононного резонанса в наноструктурах типа ядро/оболочка обусловлено сильной связью между поперечными и продольными модами фононов из-за различия их скоростей в слоях Si и Ge на границе раздела [18]. Это приводит к деформациям решеток вблизи межфазной границы и, как результат, к сцеплению этих мод, т.е. поперечные моды не могут распространяться вдоль направления роста нанопроволоки, что уменьшает ее теплопроводность. Для структуры Si-ядро/Ge-оболочка при появлении ядра Si (с объемной долей  $\sim 20\%$ ) его вклад в теплопроводность (с учетом  $\kappa_L^{\text{Si}} > \kappa_L^{\text{Ge}}$ ) остается все еще недостаточным, чтобы компенсировать рассеяние фононов на границе раздела Si/Ge и влияние эф-

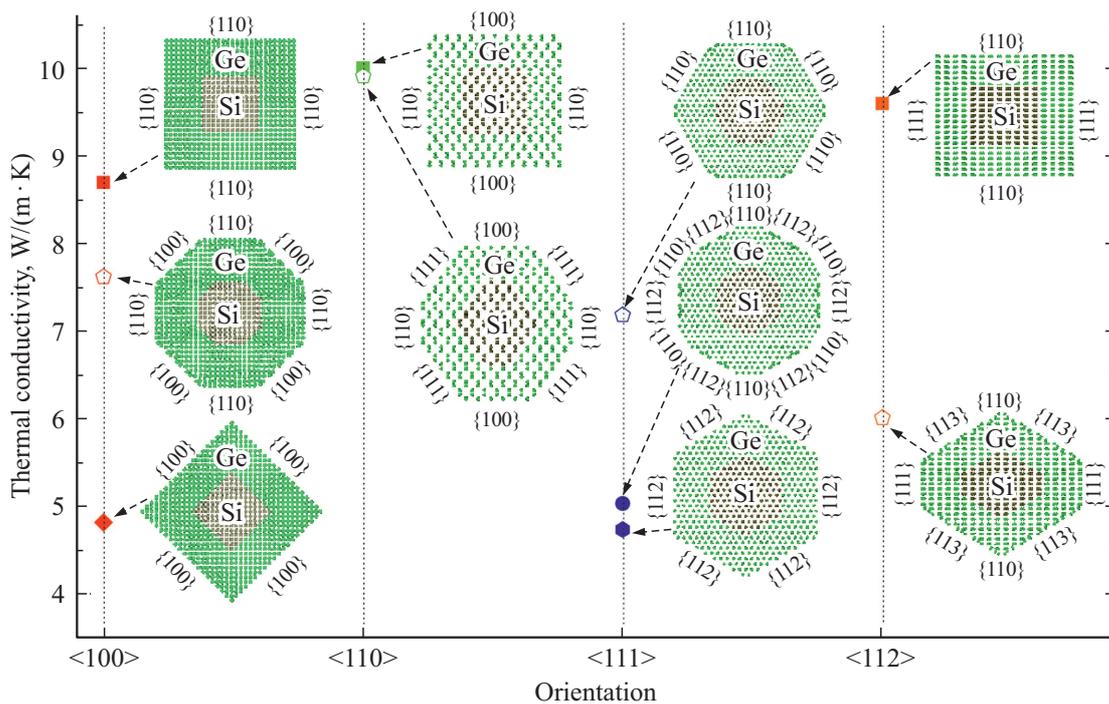


**Рис. 2.** Зависимость теплопроводности нанопроволок Si/Ge типа ядро/оболочка с различными ориентациями от объемной доли ядра. На вставках показаны морфологии нанопроволок. Легенда: Si-ядро/Ge-оболочка (квадратный маркер) и Ge-ядро/Si-оболочка (треугольный маркер).

факта когерентного фононного резонанса (рис. 2). Таким образом, несмотря на присутствие в структуре нанопроволоки Ge-ядра кремния с большим  $\kappa_L$ , происходит снижение теплопроводности наноструктуры. Очевидно, что с повышением объемной доли ядра (от  $\sim 20\%$  и более) уменьшается отношение площади поверхности ядра к его объему, поэтому эффект рассеяния фононов на продольных границах снижается [14]. В случае структуры Ge-ядро/Si-оболочка с увеличением объемной доли ядра вклад ядра Ge, а также эффекты фонон-интерфейсного рассеяния и когерентного фононного резонанса направлены в сторону уменьшения  $\kappa_L$  нанопроволоки, поэтому здесь наблюдается зависимость без ярко выраженного минимума (рис. 2). Возможно, что в случае, когда вклад оболочки Si в теплопроводность нанопроволоки не компенсирует эффекты фонон-интерфейсного рассеяния и когерентного фононного резонанса, то на кривой зависимости  $\kappa_L$  от объемной доли ядра будет наблюдаться неглубокий минимум, как в работе [14]. Подчеркнем, что

в нашем случае нанопроволоки имеют более сложную морфологию, поэтому при варьировании объемной доли ядра будет меняться и соотношение размеров граней ядра. Последнее отразится на интенсивности фонон-интерфейсного рассеяния и соответственно на величине теплопроводности, что дополнительно усложняет интерпретацию полученных результатов. Отметим, что фонон-поверхностное рассеяние будет влиять главным образом на теплопроводность оболочки, вклад которой становится незначительным по мере уменьшения ее толщины. Учитывая анизотропии тепловой проводимости и групповой скорости фононов ( $v_{ph}$ ) в нанопроволоках Si ( $\kappa_L^{(110)} > \kappa_L^{(100)} > \kappa_L^{(111)}$  и  $v_{ph}^{(110)} > v_{ph}^{(100)} > v_{ph}^{(111)}$  [12]), можно предположить, что и в нанопроволоках Si/Ge типа ядро/оболочка преобладающее влияние на теплопроводность будет оказывать групповая скорость фононов, как в гомогенных нанопроволоках.

Как было показано выше, нанопроволоки Si-ядро/Ge-оболочка обладают наименьшими значениями теп-



**Рис. 3.** Схематическая диаграмма, иллюстрирующая влияние морфологии на теплопроводность нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка с различной ориентацией. Соответствующее значение  $\kappa_L$  для каждой структуры показано стрелкой.

лопроводности при объемной доле ядра  $\sim 10\text{--}30\%$  (рис. 2). На третьем этапе рассмотрим, как морфология — не только грани на поверхности, но и границы раздела Si/Ge с различной ориентацией — влияет на  $\kappa_L$  для нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка. Очевидно, что появление  $\{100\}$ ,  $\{112\}$  и  $\{113\}$  граней и соответствующих границ раздела Si/Ge приводит к уменьшению значений  $\kappa_L$  (рис. 3), как и в случае гомогенных нанопроволок (рис. 1). В то время как  $\{110\}$  и  $\{111\}$  грани и соответствующие границы раздела Si/Ge менее эффективно рассеивают фононы (рис. 3). Изменение значений  $\kappa_L$  может достигать  $\sim 45\%$  ( $3.9\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ ),  $\sim 0.9\%$  ( $0.1\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ ),  $\sim 34\%$  ( $2.5\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ ) и  $\sim 37\%$  ( $3.6\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ ) соответственно для  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  ориентаций.

#### 4. Заключение

Методом неравновесной молекулярной динамики исследовано влияние морфологии поверхности на фононную теплопроводность нанопроволок Si, Ge, а также Si/Ge типа ядро/оболочка с ориентациями  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$ . Установлено, что морфология поверхности может приводить к разбросу в оценках  $\kappa_L$  до  $\sim 8\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$  для гомогенных нанопроволок при 300 К. Наибольшее снижение теплопроводности выявлено для структур Si-ядро/Ge-оболочка из-за интенсивного рассеяния фононов продольными границами раздела Si/Ge и возникновения когерентного фононного резонанса вне зависимости от направления роста

нанопроволок. Минимальные значения  $\kappa_L$  для них лежат ниже, чем для нанопроволок из чистых Si и Ge, причем минимальная теплопроводность  $5.76\text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$  характерна для  $\langle 112 \rangle$ -ориентированных нанопроволок Si-ядро/Ge-оболочка при объемной доле ядра  $\sim 30\%$ . Результаты исследования свидетельствуют о потенциальной возможности применения нанопроволок Si/Ge со структурой типа ядро-оболочка в термоэлектрических устройствах на основе Si и Ge. Однако для более точной оценки эффективности термоэлектрических устройств на основе рассматриваемых структур необходимо провести дополнительные исследования фактора мощности, влияния температуры на теплопроводность, что является предметом дальнейших исследований.

#### Финансирование работы

Работы выполнены в рамках научной государственной программы Республики Беларусь „Материаловедение, новые материалы и технологии“. Работа также поддержана программой Приоритет-2030 НИЯУ МИФИ.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] F. Dominguez-Adame. Phys. E: Low-Dim. Syst. Nanostructures, **113**, 213 (2019).

- [2] А.Ф. Иоффе. *Полупроводниковые термоэлементы* (М.: Л., Изд. АН СССР, 1956) с. 103.
- [3] N.I. Goktas, P. Wilson, A. Ghukasyan, D. Wagner. *Appl. Phys. Rev.*, **5** (4), 041305 (2018).
- [4] L. Yang, Z.-G. Chen, M.S. Dargusch, J. Zou. *Adv. Energy Mater.*, **8** (6), 1701797 (2018).
- [5] W.S. Capinski, H.J. Maris, E. Bauser, I. Silier, M. Asen-Palmer, T. Ruf, M. Cardona, E. Gmelin. *Appl. Phys. Lett.*, **71** (15), 2109 (1997).
- [6] C.J. Glassbrenner, G.A. Slack. *Phys. Rev.*, **134**, A1058 (1964).
- [7] M. Hu, D. Poulikakos. *Nano Lett.*, **12**, 5487 (2012).
- [8] X. Mu, L. Wang, X. Yang, P. Zhang, A.C. To, T. Luo. *Sci. Rep.*, **5**, 16697 (2015).
- [9] J. Samaraweera, J.M. Larkin, K.L. Chan, K. Mithraratne. *J. Appl. Phys.*, **123**, 244303 (2018).
- [10] X. Chen, Z. Wang, Y. Ma. *J. Phys. Chem. C*, **115**, 20696 (2011).
- [11] M. Shelley, A.A. Mostofi. *Europhys. Lett.*, **94**, 67001 (2011).
- [12] H. Karamitaheri, N. Neophytou, M.K. Taher, R. Faez, H. Kosina. *J. Electron. Mater.*, **42** (7), 2091 (2013).
- [13] Y. Zhou, Y. Chen, M. Hu. *Sci. Rep.*, **6**, 24903 (2016).
- [14] S. Sarikurt, A. Ozden, A. Kandemir, C. Sevik, A. Kinaci, J.B. Haskins, T. Cagin. *J. Appl. Phys.*, **119**, 155101 (2016).
- [15] O. Hayden, R. Agarwal, W. Lu. *Nano Today*, **3** (5), 12 (2008).
- [16] A. Ozden, A. Kandemir, F. Ay, N.K. Perkgoz, C. Sevik. *J. Electron. Mater.*, **45**, 1594 (2016).
- [17] M. Hu, K.P. Giapis, J.V. Goicochea, X. Zhang, D. Poulikakos. *Nano Lett.*, **11** (2), 618 (2011).
- [18] J. Chen, G. Zhang, B. Li. *Nano Lett.*, **12** (6), 2826 (2012).
- [19] Y. Gao, Y. Zhou, M. Hu. *J. Mater. Chem. A*, **6**, 18533 (2018).
- [20] F. Sansoz. *Phys. Rev. B*, **93**, 195431 (2016).
- [21] A. Porter, C. Tran, F. Sansoz. *Phys. Rev. B*, **93**, 195431 (2016).
- [22] T. Markussen. *Nano Lett.*, **12** (9), 4698 (2012).
- [23] J.-N. Shen, L.-M. Wu, Y.-F. Zhang. *J. Mater. Chem. A*, **2**, 2538 (2014).
- [24] P. Heino. *Eur. Phys. J. B*, **60** (2), 171 (2007).
- [25] Z. Aksamija, I. Knezevic. *Phys. Rev. B*, **82** (4), 045319 (2010).
- [26] H. Karamitaheri, N. Neophytou, H. Kosina. *J. Appl. Phys.*, **113** (20), 204305 (2013).
- [27] D.B. Migas, V.E. Borisenko. *J. Appl. Phys.*, **105**, 104316 (2009).
- [28] D.B. Migas, V.E. Borisenko, Rusli, C. Soci. *Nano Converg.*, **2**, 16 (2015).
- [29] S. Plimpton. *J. Comp. Phys.*, **117**, 1 (1995).
- [30] J. Tersoff. *Phys. Rev. B*, **39** (8), 5566 (1989).
- [31] Y. He, I. Savic, D. Donadio, G. Galli. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 16209 (2012).
- [32] Y.S. Ju, K.E. Goodson. *Appl. Phys. Lett.*, **74** (20), 3005 (1999).
- [33] А.Л. Хомец, И.И. Холяво, И.В. Сафронов, А.Б. Филонов, Д.Б. Мигас. *ФТТ*, **64** (5), 564 (2022).

Редактор Г.А. Оганесян

## Effect of morphology on the phonon thermal conductivity of Si, Ge, and Si/Ge core/shell nanowires

I.I. Khaliava<sup>1</sup>, A.L. Khamets<sup>1</sup>, I.V. Safronov<sup>2</sup>, A.B. Filonov<sup>1</sup>, D.B. Migas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 220013 Minsk, Belarus

<sup>2</sup> Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus

<sup>3</sup> National Research Nuclear University MEPhI, 115409 Moscow, Russia

**Abstract** An additional factor in reducing thermal conductivity for thermoelectric applications of semiconductor nanowires is a change in morphology. In this paper, for Si, Ge and core/shell Si/Ge nanowires the effect of the volume fraction and the type of core material on thermal conductivity at 300 K is investigated by means of nonequilibrium molecular dynamics. Nanowires with experimentally observed  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  and  $\langle 112 \rangle$  orientations and different cross sections were taken into account. It was found that for  $\langle 112 \rangle$ -oriented Si-core/Ge-shell nanowires with a core volume fraction of  $\sim 30\%$  the thermal conductivity is the lowest ( $5.76 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ ), while the thermal conductivity values for pure Si and Ge nanowires are 13.8 and  $8.21 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ , respectively.