

Влияние эффекта взаимодиффузии на границах раздела на поперечную фононную теплопроводность в слоистых тонкопленочных структурах Ge/Si(001)

А. Л. Хомец, Д. Б. Мигас

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
г. Минск, Республика Беларусь

В данной работе представлены результаты исследования поперечной фононной теплопроводности для тонкопленочных структур Ge/Si(001) с резкими и перемешанными границами раздела. Было установлено, что при толщине тонкопленочных структур Ge/Si(001) более 5 нм имеет место существенное снижение теплопроводности при увеличении толщины перемешанных границ раздела.

Ключевые слова: теплопроводность, молекулярная динамика, границы раздела.

Введение

Для увеличения эффективности термоэлектрических материалов используются структуры пониженной размерности, которые могут рассеивать фононы в широком диапазоне частот и существенно снижать их теплопроводность. Ранее нами было продемонстрировано, что поперечная теплопроводность существенно снижается в слоистых структурах Si/Ge за счет наличия резких границ раздела, которые компенсируют вклад более теплопроводящих слоев Si и теплопроводность таких структур ниже, чем для аналогичных по толщине Ge пленок, что свидетельствует о сильном фонон-интерфейсном рассеянии [1]. Целью данной работы является исследование влияния толщины перемешанных границ раздела на фононную теплопроводность в слоистых тонкопленочных структурах Ge/Si(001).

Результаты моделирования

В данной работе рассматривались слоистые пленки Ge/Si(001) с резкими и перемешанными границами раздела. Для всех пленок проводилась $p(2 \times 1)$ реконструкция поверхности. Слои Si и Ge имели толщину по 8 моноатомных слоев (далее МС), которые образовывали один Ge/Si бислой толщиной 2.2 нм. Перемешанные границы раздела формировались при 300 К гибридным методом Монте-Карло-молекулярная динамика (программный пакет LAMMPS), и имели толщину в 2 и 4 МС. Расчет теплопроводности проводился с помощью метода неравновесной молекулярной динамики при 300 К. Межатомное взаимодействие описывалось с помощью потенциала Терсоффа. Коэффициент фононной теплопроводности определялся спустя 5 нс после моделирования из закона Фурье.

Основываясь на результатах расчетов, было установлено, что для слоистых пленок Ge/Si с толщиной более 5 нм наблюдается снижение теплопроводности при увеличении толщины перемешанных границ раздела до 2 и 4 МС (рис. 1). При этом с повышением толщины с 5 до 20 нм увеличивается разница в значениях теплопроводности в сравнении с пленками с резкими границами раздела с 1 % до 37 % для 2 МС и с 16 % до 51 % для 4 МС границ раздела вследствие уширения области разупорядочения. Более низкое значение теплопроводности для слоистой пленки Ge/Si толщиной 2.2 нм с резкой границей раздела в сравнении со структурами с перемешанными границами раздела обусловлено повышением теплового граничного сопротивления [2]. С увеличением толщины границы раздела тепловое граничное сопротивление снижается, а затем снова повышается [2], при этом этот эффект более ярко выражен в случае, когда тепловой поток распространяется из Ge в Si. Также в слоистой пленке Ge/Si с толщиной 2.2 нм для случая 4 МС перемешанных границы раздела теплопроводность ниже, чем для случая 2 МС, что связано с повышением теплового граничного сопротивления

с увеличением толщины перемешанных границ раздела вследствие увеличения фононного рассеяния внутри границ раздела [2].

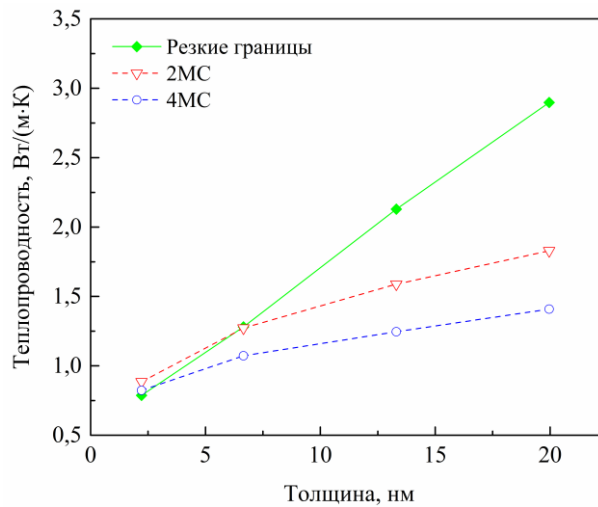


Рис. 1. Зависимость поперечной фононной теплопроводности при 300 К от толщины тонкопленочных структур Ge/Si(001) для различных типов границ

Заключение

Проведен расчет поперечной фононной теплопроводности в слоистых тонкопленочных структурах Ge/Si(001) с помощью метода неравновесной молекулярной динамики. Полученные зависимости показывают, что для однопериодических структур теплопроводность ниже в случае резких границ раздела, однако при увеличении числа периодов перемешанные границы раздела начинают более эффективно рассеивать фононы, что приводит к более низким значениям теплопроводности. Также имеет место влияние толщины перемешанной границы раздела, где разница в теплопроводности, при толщине пленки в ~ 20 нм, может составлять 23 %.

Список источников

- [1] **Khamets, A.L.** Orientation and size effects on phonon thermal conductivity in silicon/germanium multilayer structures / A.L. Khamets, I.I. Khaliava, A.B. Filonov, D.B. Migas // Japanese Journal of Applied Physics. — 2023. — Vol. 62. — P. SD0804. — DOI:10.35848/1347-4065/acad0c.
- [2] **Hahn, K.R.** Thermal boundary resistance at Si/Ge interfaces determined by approach-to-equilibrium molecular dynamics simulations / K.R. Hahn, M. Puligheddy, L. Colombo // Physical Review B. — 2015. — Vol. 91. — P. 195313. DOI:10.1103/PhysRevB.91.195313.

Effect of interdiffusion at interfaces on the cross-plane phonon thermal conductivity in layered thin-film Ge/Si(001) structures

A. L. Khamets, D. B. Migas

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

In this paper we present the results of studying the cross-plane phonon thermal conductivity for Ge/Si(001) layered thin-film structures with sharp and mixed interfaces. It was found that, when Ge/Si(001) thin-film structures are thicker than 5 nm, there is a significant decrease in thermal conductivity with an increase in the thickness of mixed interfaces.

Keywords: Thermal conductivity, Molecular dynamics, Interfaces