

В.В. КУРИЛЮК, С.С. СЕМЧУК, А.М. КУРИЛЮК, П.П. КОГУТЮК

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Вул. Володимирська, 60/, Київ 01601; e-mail: kuryluk@univ.kiev.ua)

ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ Si НАНОНИТОК З АМОРФНОЮ SiO₂ ОБОЛОНКОЮ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК

УДК 536.21

Методом нерівноважної молекулярної динаміки досліджено процеси теплового транспорту в Si нанонитках, покритих оболонкою аморфного SiO₂. Розглянуто вплив товщини аморфного шару, радіуса кристалічного кремнієвого ядра і температури на величину коефіцієнта теплопровідності нанониток. Встановлено, що збільшення товщини аморфної оболонки зумовлює зменшення теплопровідності Si/SiO₂ нанониток типу ядро-оболонка. Результати також показують, що теплопровідність Si/SiO₂ нанониток при 300 K зростає зі збільшенням площі поперечного перерізу кристалічного Si ядра. Виявлено, що температурна залежність коефіцієнта теплопровідності Si/SiO₂ нанониток типу ядро-оболонка є суттєво слабшою, ніж в кристалічних кремнієвих нанонитках. Показано, що така відмінність є результатом різних домінуючих механізмів фононного розсіювання в нанонитках. Отримані результати демонструють, що нанонитки Si/SiO₂ є перспективним матеріалом для термоелектричних застосувань.

Ключові слова: коефіцієнт теплопровідності, нанонитка, кремній, молекулярна динаміка.

1. Вступ

Впродовж останнього десятиліття кремнієві нанонитки неперервно інтегруються в сучасну електроніку, сенсорну та оптоелектронну техніку. Унікальні фізичні властивості, з одного боку, та сумісність методів синтезу з існуючою кремнієвою технологією, з іншого боку, сприяють інтенсивному розвитку досліджень нанониток та їх впровадженню в різних галузях. Зокрема, Si нанонитки розглядаються як основа для виготовлення польових транзисторів [1], сонячних елементів [2], ультрачутливих електромеханічних та біологічних сенсорів [3]. Активно вивчаються перспективи використання кремнієвих ниток для покращення функціональних параметрів світловипромінюючих пристроїв [4], літій-йонних батарей [5].

© В.В. КУРИЛЮК, С.С. СЕМЧУК, А.М. КУРИЛЮК,
П.П. КОГУТЮК, 2021

Окремим напрямом, в якому проводиться низка сучасних досліджень, є вивчення можливостей Si наноструктур для підвищення ефективності енергоперетворення в термоелектричних елементах [6–8]. Відомо, що коефіцієнт корисної дії термоелектричного елемента визначається безрозмірною величиною термоелектричної добротності ZT [9]:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{k}, \quad (1)$$

де S – коефіцієнт Зеебека, σ – питома електропровідність, k – коефіцієнт теплопровідності, T – температура. Як випливає з (1), одним зі способів підвищення ефективності термоелектричного перетворення є зниження теплопровідності робочого матеріалу без суттєвих змін його електропровідності. Напівпровідникові нанонитки дозволяють реалізувати вказані зміни теплопровідності завдяки розвиненій поверхні, що слугує додатковим цен-

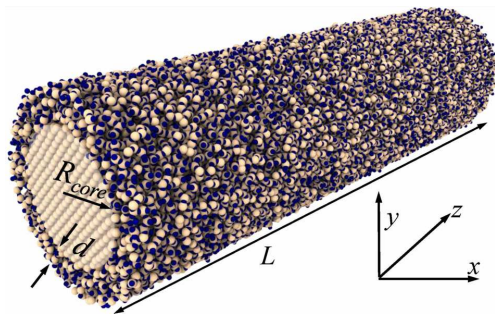


Рис. 1. Схема досліджуваної нанонитки Si/SiO₂ типу ядро-оболонка. Атоми Si та O зображено світлими і темними кружечками, відповідно

тром розсіювання фононів. Зокрема, експериментально було виявлено, що в кремнієвих нанонитках з шорсткою поверхнею величина ZT наближається до одиниці завдяки майже 100-кратному зменшенню коефіцієнта теплопровідності відносно аналогічного значення k в об'ємному Si [10]. Для подальшого підвищення термоелектричної добротності в ряді теоретичних робіт пропонувався широкий спектр методів зменшення коефіцієнта теплопровідності нанониток, серед яких - оптимізація геометричних параметрів (поперечного перерізу [11], кристалографічної орієнтації [12], ступеня пористості структури [13]), варіації композитного [14] і дефектного [15] складу нанониток, деформація [16], створення надграток [17]. З іншого боку, сучасні експериментальні дослідження також відкривають нові шляхи до контролю величини коефіцієнта теплопровідності нанониток. Зокрема, з використанням методу раманівського розсіювання світла було виявлено сильну анізотропію величини k в масивах кремнієвих нанониток [18], що дозволяє керувати змінювати теплопровідність матеріалу відповідним вибором напрямку теплового потоку. Не менш ефективним способом зменшення теплопровідності Si нанониток є синтез структур з шорсткою поверхнею [19]. В нещодавніх експериментах з кремнієвими нанонитками було продемонстровано можливість варіації їх теплопровідності в широких межах шляхом неоднорідного розподілу легуючих домішок в нанонитках [20] чи вибору рівня легування Si підкладок, на яких синтезуються нанонитки [21].

Іншим методом зниження теплопровідності нанониток є використання структур типу ядро-оболонка, зокрема, нанониток Si/Ge [22]. Показа-

но, що нанесення на кремнієву нанонитку тонкої оболонки Ge зумовлює зниження коефіцієнта теплопровідності приблизно на 75% [23]. Заміна кристалічної оболонки на аморфну шляхом аморфізації поверхневого Si шару здатна посилити ефект зменшення теплопровідності до 80% [24]. Але фізичні механізми зменшення теплопровідності в подібних нанонитках, як і їхні перспективи використання в термоелектричних пристроях, вивчені далеко не повністю.

Появу аморфної оболонки в кремнієвих нанонитках відносно легко можна реалізувати в процесі синтезу через утворення шару природного окислу SiO₂ з можливістю варіації його товщини. В представленій роботі досліджуються теплові властивості кремнієвих нанониток з аморфною оболонкою SiO₂. Зокрема, з використанням методу нерівноважної молекулярної динаміки встановлено залежності впливу товщини оболонки SiO₂ на величину коефіцієнта теплопровідності нанониток. Також досліджено вплив аморфного шару на температурні залежності коефіцієнта теплопровідності. Отримані дані проаналізовано з точки зору процесів фононного розсіювання на межах поділу кристалічне ядро – аморфна оболонка.

2. Методика досліджень

Вивчалися процеси теплоперенесення в циліндричних нанонитках, які складались з кристалічного кремнієвого ядра радіусом R_{core} , зовні оточеного оболонкою аморфного SiO₂ товщиною d (рис. 1). На першому етапі побудови модельованої структури генерувалась суцільна нанонитка аморфного SiO₂. Для цього використовувалась структура кристалічного кварцу α -SiO₂ тригональної сингонії з параметрами решітки $a = 4,19 \text{ \AA}$, $c = 5,40 \text{ \AA}$. Аморфізація здійснювалась шляхом витримки системи при температурі $T = 3000 \text{ K}$ з подальшим різким охолодженням (10^{11} K/c) до $T = 300 \text{ K}$ в умовах термостата Ланжевена. Далі всередині аморфної нанонитки видалялись всі атоми Si та O для утворення циліндричної порожнини радіусом R_{core} . Після цього порожнина заповнювалась атомами Si, розміщеними в вузлах кристалічної решітки. Моделювання процесів теплоперенесення в нанонитках виконувались за допомогою пакета молекулярної динаміки LAMMPS [25]. На гранях, перпендикулярних до осі нанонитки, накладались

періодичні граничні умови, тоді як бічна поверхня розглядалась вільною. Досліджувана структура витримувалась при постійному тиску і температурі (NPT-ансамбль) впродовж 250 пс до повної релаксації механічних напружень. Інтегрування рівнянь руху здійснювалось з кроком по часу 0,5 фс. Взаємодія між атомами в нанонитках описувалась за допомогою емпіричного потенціалу Терсоффа [26], використання якого приводить до задовільних результатів при розгляді процесів теплоперенесення в наноструктурах на основі аморфного SiO₂ та кремнію [27] чи германію [28].

В даній роботі визначався коефіцієнт теплопровідності k вздовж осі досліджуваних циліндричних нанониток (напрямок Oz на рис. 1). Розрахунки коефіцієнта теплопровідності здійснювались методом нерівноважної молекулярної динаміки за допомогою алгоритму Мюллер–Плата [29]. Для визначення величини k в рамках зазначеного алгоритму використовується закон Фур'є:

$$k = -\frac{q_z}{dT/dz}, \quad (2)$$

де q_z , dT/dz – потік тепла і температурний градієнт у вибраному напрямку, відповідно. Для створення теплового потоку алгоритм Мюллер–Плата передбачає таку процедуру. На першому етапі здійснюється розбиття досліджуваної структури на тонкі шари. Центральний шар називають “гарячим”, а один з крайніх – “холодним” (рис. 2). В процесі динаміки періодично, через певну кількість кроків, визначаються атом з мінімальною швидкістю v_h (кінетичною енергією) в “гарячому” шарі та атом з максимальною швидкістю v_c в “холодному” шарі. Між вказаними атомами відбувається штучний обмін їхніми швидкостями (енергіями), що еквівалентно появі в структурі теплового потоку q_z величиною

$$q_z = \frac{1}{2tS} \sum_{N_{\text{transfers}}} \frac{1}{2} M [v_c^2 - v_h^2], \quad (3)$$

де t – час, впродовж якого відбуваються обміни швидкостями, S – площа поперечного перерізу зразка, M – маса атома.

В результаті описаних багатократних обмінів швидкостями, середня кінетична енергія атомів, а, отже, і температура “гарячого” шару буде вищою, ніж середня температура зразка. Відповідно,

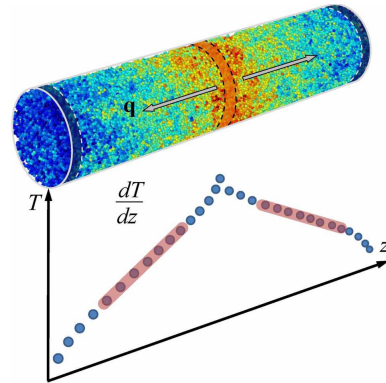


Рис. 2. Схема реалізації алгоритму Мюллер–Плата для визначення коефіцієнта теплопровідності нанонитки. В верхній частині пунктиром показано центральний і два крайні шари, на які розбивається нанонитка. Стрілками показано напрямки теплового потоку q в структурі. В нижній частині схематично зображено розподіл температури вздовж нанонитки. Лініями на залежності $T(z)$ виділено ділянки, з яких визначається градієнт температури

температура “холодного” шару виявиться нижчою, ніж її середнє значення по зразку. Температуру T_i кожного i -го шару можна обчислити за співвідношенням:

$$T_i = \frac{1}{t_{av}} \sum_t \left[\frac{1}{3} N_i k_B \sum_{j=1}^{N_i} M_j v_j^2 \right], \quad (4)$$

де N_i – кількість атомів в i -му шарі, k_B – постійна Больцмана, t_{av} – час усереднення при розрахунку температури.

Розрахунок теплопровідності за алгоритмом Мюллер–Плата проводиться за умови встановлення в структурі стаціонарного теплового потоку. В даній роботі аналізувалась часова зміна повної енергії системи $E(t)$, лінійна залежність якої вказує на реалізацію стаціонарних умов. Після встановлення стаціонарного режиму в структурі виникне градієнт температури dT/dz , для розрахунку якого на залежності $T(z)$ (рис. 2) вибираються лінійні ділянки з метою усунення впливу границь зразка. За відомими q_z та dT/dz розраховується коефіцієнт теплопровідності структури відповідно до співвідношення (2).

3. Результати та їх обговорення

На першому етапі досліджень було розраховано температурні залежності коефіцієнта теплопровідності Si нанониток з аморфною оболонкою SiO₂.

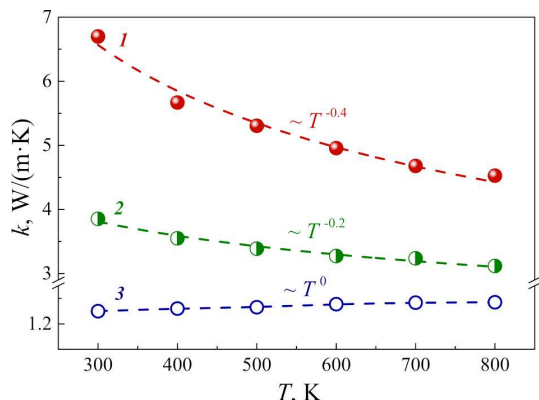


Рис. 3. Температурна залежність коефіцієнта теплопровідності Si (крива 1), Si/SiO₂ (крива 2) та SiO₂ нанониток

На рис. 3 показано отримані залежності $k(T)$ для трьох нанониток однакового радіуса $R = 3,5$ нм: кристалічної Si-нанонитки без аморфної оболонки, Si-нанонитки з оболонкою SiO₂ товщиною $d = 0,5$ нм та аморфної SiO₂-нанонитки, що не містить кремнієвого кристалічного ядра. В усьому досліджуваному інтервалі температур 300–800 К кремнієва нанонитка має найбільшу теплопровідність, тоді як аморфна SiO₂-нанонитка характеризується мінімальним k , а для нанонитки типу ядро-оболонка притаманними є проміжні значення коефіцієнта теплопровідності. З ростом температури спостерігається монотонне зменшення коефіцієнта теплопровідності нанониток Si та Si/SiO₂, тоді як для аморфної SiO₂-нанонитки величина k практично не змінюється з ростом температури і дорівнює $k = 1,3$ Вт/(м·К), що є близьким до величини теплопровідності об'ємного SiO₂ [28]. Апроксимація отриманих залежностей $k(T)$ показує, що $k \sim T^{-0.4}$ для кремнієвої нанонитки, $k \sim T^{-0.2}$ для Si нанонитки з оболонкою SiO₂ і $k \sim T^0$ для нанонитки з аморфного SiO₂.

Відомо, що фононну теплопровідність твердих тіл можна оцінити за співвідношенням:

$$k = \frac{1}{3} c_{ph} v_{ph} \lambda_{ph}, \quad (5)$$

де c_{ph} , v_{ph} , λ_{ph} – фононна теплоємність, швидкість та довжина вільного пробігу фононів, відповідно. В області достатньо високих температур теплоємність твердих тіл згідно з законом Дюлонга–Пті є константою, а швидкість поширення фоно-

нів також слабо змінюється з температурою. Тому залежність $k(T)$ при високих температурах визначатиметься температурною залежністю довжини вільного пробігу фононів. З ростом температури домінуючим механізмом, що обмежуватиме рух фононів є процеси фонон-фононного розсіювання, а довжина вільного пробігу λ_{ph} буде обернено пропорційною до концентрації фононів n_{ph} . З іншого боку, оскільки при високих температурах $n_{ph} \sim T$, то для монокристалів Si виконуватиметься пропорційність $k \sim T^{-1}$, що підтверджується експериментально [30].

Зі зменшенням характерних розмірів при переході системи від нескінченного монокристала до нанонитки, проявлятиметься дія іншого механізму обмеження руху фононів – розсіювання на границях матеріалу. У випадку, коли характерний розмір системи L стає порівняним з довжиною вільного пробігу фононів, отримуємо $\lambda_{ph} \sim L = \text{const}$, тому $k \sim T^0$. Така ситуація реалізується, наприклад, в аморфній нанонитці, де теплові коливання обмежені кількома міжатомними відстанями внаслідок неупорядкованості структури. З наведених міркувань випливає, що отримана залежність $k \sim T^{-0.4}$ для Si нанонитки є результатом дії двох конкуруючих механізмів розсіювання: фонон-фононного із залежністю $k \sim T^{-1}$ та розсіювання на бічній поверхні нанонитки, для якого $k \sim T^0$. Повільніше зменшення теплопровідності з ростом T в нанонитці Si/SiO₂ з аморфною оболонкою можна пояснити такими обставинами. По-перше, нанонитка Si/SiO₂ має менший радіус кристалічного ядра порівняно з кремнієвою нанониткою, а, відповідно, менший об'єм теплопровідного матеріалу і більшу питому поверхню, що зумовлює сильніше розсіювання фононів з одночасним зменшенням теплопровідності структури. По-друге, як показано в роботі [31], фононний спектр гетероструктур Si/SiO₂ містить нову низькочастотну смугу ($f < 4$ ТГц) локалізованих коливань, пов'язаних з атомами на межі поділу Si/SiO₂. Випадковий розподіл вказаних коливальних станів на гетеромежі досліджуваної нанонитки спричинює додаткове розсіювання теплових коливань з відповідним зменшенням величини k .

Для дослідження впливу товщини оксидної оболонки SiO₂ на величину теплопровідності, в роботі розраховувались залежності $k(d/R_{\text{core}})$ нанониток Si/SiO₂ з фіксованим радіусом R_{core} кристалічного

кремнієвого ядра. Отримані криві $k(d/R_{\text{core}})$ для двох нанониток з $R_{\text{core}} = 1,5$ нм та $R_{\text{core}} = 3$ нм при $T = 300$ К показано на рис. 4. Нанонитка з більшим радіусом кристалічного ядра характеризується вищим коефіцієнтом теплопровідності k у всьому інтервалі значень d/R_{core} . Цей результат є зрозумілим з огляду на те, що нанонитка з меншим R_{core} має більшу питому поверхню кристалічного теплопровідного ядра, наслідком чого є вищий темп розсіювання фононів на гетеромежі Si/SiO₂. З ростом товщини d аморфної оболонки SiO₂ спостерігається монотонне зменшення теплопровідності k досліджуваних нанониток. Зростання співвідношення d/R_{core} в межах 0,1–0,7 зумовлює зниження величини k для обох нанониток майже в 1,5 раза.

При поясненні такої поведінки коефіцієнта теплопровідності слід врахувати, що в нанонитках Si/SiO₂ теплоперенесення здійснюється двома незалежними каналами – кристалічним ядром та аморфною оболонкою. Результируюча теплопровідність нанонитки визначається об'ємною часткою кожного каналу і величиною його власної теплопровідності та може бути описана за допомогою простого співвідношення [32]:

$$k = \frac{k_{\text{core}} R_{\text{core}}^2}{(R_{\text{core}} + d)^2} + \frac{k_{\text{shell}} ((R_{\text{core}} + d)^2 - R_{\text{core}}^2)}{(R_{\text{core}} + d)^2}, \quad (6)$$

де перший і другий доданки – це відповідно теплопровідність ядра та оболонки, зважена на їхню об'ємну частку в нанонитці. Як випливає з наведеного виразу, зростання товщини d аморфної оболонки при незмінному радіусі R_{core} кристалічного ядра збільшуватиме об'ємну частку матеріалу з низькою теплопровідністю, що в підсумку й приводитиме до зменшення сумарної теплопровідності нанонитки.

Аналіз виразу (6) вказує також на те, що при фіксованій товщині d аморфної оболонки SiO₂, сумарний коефіцієнт теплопровідності Si/SiO₂ нанонитки буде зростати зі збільшенням радіуса кристалічного ядра. Цей висновок підтверджується розрахунками, результати яких показано на рис. 5 для двох нанониток з фіксованою товщиною SiO₂-оболонки $d = 0,5$ нм та $d = 1$ нм. Коефіцієнт теплопровідності аморфної SiO₂-нанонитки ($R_{\text{core}} = 0$) приблизно дорівнює $k = 1,3$ Вт/(м·К) і стрімко збільшується при зростанні частки кристалічного ядра. Зокрема, при збільшенні R_{core} до 4 нм,

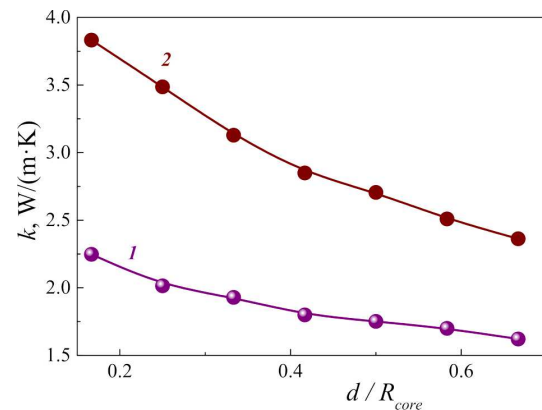


Рис. 4. Залежність коефіцієнта теплопровідності Si/SiO₂ нанониток з радіусами кристалічного ядра $R_{\text{core}} = 1,5$ нм (крива 1) та $R_{\text{core}} = 3$ нм (крива 2) від товщини d аморфної оболонки SiO₂, розрахована для температури $T = 300$ К

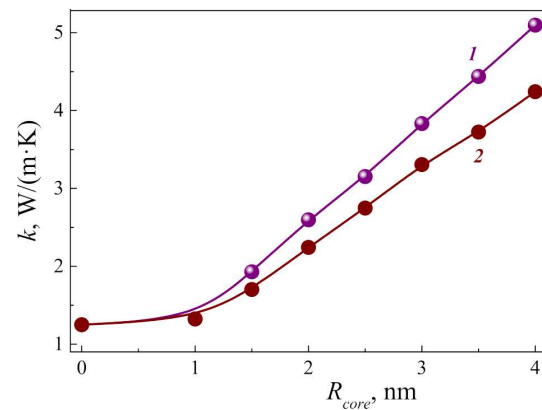


Рис. 5. Залежність коефіцієнта теплопровідності Si/SiO₂ нанониток від радіуса d кристалічного Si ядра з фіксованою товщиною аморфної оболонки SiO₂ $d = 0,5$ нм (крива 1) та $d = 1,0$ нм (крива 2), розрахована для температури $T = 300$ К

величина k різко зростає до майже 5 Вт/(м·К) і 4 Вт/(м·К) в нанонитках із $d = 0,5$ нм та $d = 1,0$ нм, відповідно. Отримані результати вказують на можливість контрольованої зміни коефіцієнта теплопровідності Si нанониток шляхом варіації товщини оксидної оболонки, що легко реалізується в процесі вирощування вказаних структур.

4. Висновки

Методом нерівноважної молекулярної динаміки розраховано коефіцієнт теплопровідності кремнієвих нанониток з аморфною оболонкою SiO₂. На основі аналізу температурних залежностей

$k(T)$ показано, що процеси теплоперенесення в досліджуваних Si/SiO₂ нанонитках визначаються двома конкуруючими механізмами розсіювання: фонон-фононим та фонон-граничним. Встановлено, що збільшення товщини аморфної оболонки SiO₂ при незмінних розмірах кристалічного Si ядра зумовлює зменшення теплопровідності Si/SiO₂ нанониток. З іншого боку, при фіксованій товщині шару природного окислу, коефіцієнт теплопровідності нанониток різко збільшується зі зростанням радіуса кремнієвого ядра. Отримані результати можуть лягти в основу методів оптимізації термоелектричних перетворювачів на основі кремнієвих наноструктур.

Автори висловлюють подяку Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України за наданий доступ до обчислювального ґрід-кластера для здійснення розрахунків методом молекулярної динаміки. В.В. Курилюк та С.С. Семчук висловлюють подяку Національному фонду досліджень України за часткову підтримку роботи (проект 2020.02/0067).

1. Y. Cui, Z. Zhong, D. Wang, W.U. Wang, C.M. Lieber. High performance silicon nanowire field effect transistors. *Nano Lett.* **3**, 149 (2003).
2. Y. He, W. Yu, G. Ouyang. Shape-dependent conversion efficiency of Si nanowire solar cells with polygonal cross-sections. *J. Appl. Phys.* **119**, 225101 (2016).
3. M.N. Esfahani, Y. Kilinc, M.C. Karakan, E. Orhan, M.S. Hanay, Y. Leblebici, B.E. Alaca. Piezoresistive silicon nanowire resonators as embedded building blocks in thick SOI. *J. Micromechanics and Microengineering* **28**, 045006 (2018).
4. A.K. Katiyar, A.K. Sinha, S. Manna, S.K. Ray. Fabrication of Si/ZnS radial nanowire heterojunction arrays for white light emitting devices on Si substrates. *ACS Applied Materials & Interfaces* **6**, 15007 (2014).
5. Y. Yang, W. Yuan, W. Kang, Y. Ye, Q. Pan, X. Zhang, Y. Ke, C. Wang, Z. Qiu, Y. Tang. A review on silicon nanowire-based anodes for next-generation high-performance lithium-ion batteries from a material-based perspective. *Sustainable Energy & Fuels* **3**, 1 (2020).
6. N.I. Goktas, P. Wilson, A. Ghukasyan, D. Wagner, S. McNamee, R.R. LaPierre. Nanowires for energy: A review. *Applied Physics Reviews* **5**, 041305 (2018).
7. F. Domínguez-Adame, M. Martín-González, D. Sánchez, A. Cantarero. Nanowires: A route to efficient thermoelectric devices. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **113**, 213 (2019).
8. O. Korotchenkov, A. Nadtochiy, V. Kuryliuk, C.-C. Wang, P.-W. Li, A. Cantarero. Thermoelectric energy conversion in layered structures with strained Ge quantum dots grown on Si surfaces. *Europ. Phys. J. B* **87**, 64 (2014).
9. A. Majumdar. Thermoelectricity in semiconductor nanostructures. *Science* **303**, 777 (2004).
10. A.I. Hochbaum, R. Chen, R.D. Delgado, W. Liang, E.C. Garnett, M. Najarian, A. Majumdar, P. Yang. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires. *Nature* **451**, 163 (2008).
11. J. Chen, G. Zhang, B. Li. A universal gauge for thermal conductivity of silicon nanowires with different cross sectional geometries. *J. Chem. Phys.* **135**, 204705 (2011).
12. A. Paul, M. Luisier, G. Klimeck. Shape and orientation effects on the ballistic phonon thermal properties of ultra-scaled Si nanowires. *J. Appl. Phys.* **110**, 114309 (2011).
13. J.M. Weisse, A.M. Marconnet, D. Kim, P.M. Rao, M.A. Panzer, K.E. Goodson, X. Zheng. Thermal conductivity in porous silicon nanowire arrays. *Nanoscale Res. Lett.* **7**, 554 (2012).
14. S. Yi, C. Yu. Modeling of thermoelectric properties of SiGe alloy nanowires and estimation of the best design parameters for high figure-of-merits. *J. Appl. Phys.* **117**, 035105 (2015).
15. M. Royo, R. Rurali. Tuning thermal transport in Si nanowires by isotope engineering. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 26262 (2016).
16. M.G. Shahraki, Z. Zeinali. Effects of vacancy defects and axial strain on thermal conductivity of silicon nanowires: A reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation. *J. Phys. Chem. Sol.* **85**, 233 (2015).
17. C.W. Zhang, H. Zhou, Y. Zeng, L. Zheng, Y.L. Zhan, K.D. Bi. A reduction of thermal conductivity of non-periodic Si/Ge superlattice nanowire: Molecular dynamics simulation. *Intern. J. Heat and Mass Transfer* **132**, 681 (2019).
18. M. Isaiev, O. Didukh, T. Nychporuk, V. Timoshenko, V. Lysenko. Anisotropic heat conduction in silicon nanowire network revealed by Raman scattering. *Appl. Phys. Lett.* **110**, 011908 (2017).
19. J.P. Feser, J.S. Sadhu, B.P. Azeredo, K.H. Hsu, J. Ma, J. Kim, M. Seong, N.X. Fang, X. Li, P.M. Ferreira, S. Sinha, D.G. Cahill. Thermal conductivity of silicon nanowire arrays with controlled roughness. *J. Appl. Phys.* **112**, 114306 (2012).
20. F. Zhuge, T. Takahashi, M. Kanai, K. Nagashima, N. Fukata, K. Uchida, T. Yanagida. Thermal conductivity of Si nanowires with δ -modulated dopant distribution by self-heated 3ω method and its length dependence. *J. Appl. Phys.* **124**, 065105 (2018).
21. P. Lishchuk, M. Isaiev, L. Osminkina, R. Burbelo, T. Nychporuk, V. Timoshenko. Photoacoustic characterization of nanowire arrays formed by metal-assisted chemical etching of crystalline silicon substrates with different doping level. *Phys. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **107**, 131 (2019).
22. S. Sarikurt, A. Ozden, A. Kandemir, C. Sevik, A. Kinaci, J.B. Haskins, T. Cagin. Tailoring thermal conductivity

- of silicon/germanium nanowires utilizing core-shell architecture. *J. Appl. Phys.* **119**, 155101 (2016).
23. M. Hu, K.P. Giapis, J.V. Goicochea, X. Zhang, D. Poulikakos. Significant reduction of thermal conductivity in Si/Ge core-shell nanowires. *Nano Lett.* **11**, 618 (2011).
 24. X. Liu, G. Zhang, Q. Pei, Y. Zhang. Modulating the thermal conductivity of silicon nanowires via surface amorphization. *Sci. China Technol. Sci.* **57**, 699 (2014).
 25. S. Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J. Computational Phys.* **117**, 1 (1995).
 26. J. Tersoff. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys. Rev. B* **39**, 5566 (1989).
 27. V. Kuryliuk, S. Semchuk. Molecular dynamics calculation of thermal conductivity in a-SiO₂ and an a-SiO₂-based nanocomposite. *Ukr. J. Phys.* **61**, 835 (2016).
 28. V.V. Kuryliuk O.A. Korotchenkov. Atomistic simulation of the thermal conductivity in amorphous SiO₂ matrix/Ge nanocrystal composites. *Phys. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **88**, 228 (2017).
 29. F. Müller-Plathe. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity. *J. Chem. Phys.* **106**, 6082 (1997).
 30. C.J. Glassbrenner, G.A. Slack. Thermal conductivity of silicon and germanium from 3 K to the melting point. *Phys. Rev.* **134**, A1058 (1964).
 31. T. Zushi, K. Ohmori, K. Yamada, T. Watanabe. Effect of a-SiO₂ layer on the thermal transport properties of (100) Si nanowires: A molecular dynamics study. *Phys. Rev. B* **91**, 115308 (2015).
 32. M. Hu, X. Zhang, K.P. Giapis, D. Poulikakos. Thermal conductivity reduction in core-shell nanowires. *Phys. Rev. B* **84**, 085442 (2011).

Received 03.03.20

V.V. Kuryliuk, S.S. Semchuk,
A.M. Kuryliuk, P.P. Kogutyuk

THERMAL CONDUCTIVITY OF SI
NANOWIRES WITH AN AMORPHOUS SiO₂
SHELL: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY

The processes of thermal transport in Si nanowires covered with an amorphous SiO₂ shell have been studied using the nonequilibrium molecular dynamics method. The influence of the amorphous layer thickness, radius of the crystalline silicon core, and temperature on the thermal conductivity of the nanowires is considered. It is found that the increase of the amorphous shell thickness diminishes the thermal conductivity in Si/SiO₂ nanowires of the core-shell type. The results obtained also testify that the thermal conductivity of Si/SiO₂ nanowires at 300 K increases with the cross-section area of the crystalline Si core. The temperature dependence of the thermal conductivity coefficient in Si/SiO₂ nanowires of the core-shell type is found to be considerably weaker than that in crystalline silicon nanowires. This difference was shown to result from different dominant mechanisms of phonon scattering in those nanowires. The results obtained demonstrate that Si/SiO₂ nanowires are a promising material for thermoelectric applications.

Keywords: thermal conductivity, nanowire, silicon, molecular dynamics.