

УДК 536.21.

Курилюк В. В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Кріт О. М.², к.ф.-м.н., н.с.,
Суховерська Н. М.³, лаб.

Вплив деформації на теплопровідність SiGe гетероструктур з квантовими точками

^{1,2,3}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹kuryluk@univ.kiev.ua,
²krit@univ.net.ua
³snn84@ukr.net

V. V. Kuryliuk¹, PhD., As.Prof.,
O. M. Krit², PhD. Sci.Res.,
N. M. Sukhovska³, Lab.

Strain effects on thermal conductivity of SiGe heterostructures with quantum dots

^{1,2,3}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,

e-mail: ¹kuryluk@univ.kiev.ua,
²krit@univ.net.ua
³snn84@ukr.net

В роботі використано метод нерівноважної молекулярної динаміки для дослідження впливу деформацій на теплопровідність SiGe гетероструктур з квантовими точками. Для моделювання теплопровідності кремній-германієвих гетероструктур застосовано емпіричні потенціали Стілінджер-Вебера і Терзофф. Вивчалися залежності коефіцієнта теплопровідності від гідростатичної та одновісної деформацій. Показано, що теплопровідність SiGe гетероструктур неперервно зменшується (збільшується) при зміні гідростатичної (одновісної) деформації від деформації стиснення до деформації розтягу. Для з'ясування фундаментальних фізичних механізмів проаналізовано швидкості та теплоємність, пов'язані з фононними модами. Також розраховано теплопровідність SiGe гетероструктур при $T=300$ K з різним об'ємним вмістом квантових точок. Встановлено, що теплопровідність гетероструктур нелінійно зменшується при зростанні об'ємної частки нановключень. Отриманий результат пояснюється зростанням ймовірності фононного розсіювання на границях поділу. Виявлені в роботі закономірності є важливими для термоелектричних застосувань SiGe гетероструктур з квантовими точками.

Ключові слова: теплопровідність, гетероструктура, квантова точка, молекулярна динаміка.

In this paper, non-equilibrium molecular dynamics simulations are employed to study the effects of strain on the thermal conductivity of SiGe heterostructures with quantum dots. The Stillinger–Weber and Tersoff interatomic potentials are employed to simulate thermal conductivity of SiGe heterostructures. Dependence of the thermal conductivity on hydrostatic and uniaxial strain is studied. The thermal conductivity of the strained SiGe heterostructures is shown to decrease (increase) continuously when the hydrostatic (uniaxial) strain changes from compressive to tensile. To achieve a fundamental understanding of the physical mechanisms, mode-specific group velocities of phonons and the specific heat of each propagating phonon modes are analyzed in details. We calculated also the thermal conductivity of SiGe heterostructures with different volumetric ratio of quantum dots at 300 K. It is found that by raising the volumetric ratio of nanoinclusions, thermal conductivity of heterostructures decreases nonlinearly. The decreasing thermal conductivity is due to the increased phonon scattering at high surface to volumetric ratio. Our findings are important for the thermal management in SiGe-based electronic devices and for thermoelectric applications of quantum dot heterostructures.

Key Words: thermal conductivity, heterostructure, quantum dot, molecular dynamics.

Статтю представив чл.-кор. НАНУ, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

На сьогодні кремній-германієві гетероструктури з квантовими точками розглядаються як перспективні матеріали для

розробки термоелектричних перетворювачів енергії [1]. Оскільки ефективність термоелектричного перетворення обернено пропорційна до теплопровідності [2], то низка сучасних досліджень в даній галузі спрямована

на пошук методів контрольованого зниження теплопровідності матеріалів без суттєвої зміни його електропровідності [3]. Одним з таких методів впливу може розглядатись деформація. Зокрема, наявні дані вказують на можливість деформаційного тюнінгу коефіцієнта теплопровідності квантових ниток, кремнієвих наноплівочок та моношарів (силіцен) [4-6].

В даній роботі з використанням методу молекулярної динаміки (МД) проведено моделювання процесів теплоперенесення в SiGe гетероструктурах з квантовими точками (КТ) під дією зовнішньої деформації. Розглянуто вплив гідростатичної та одновісної деформацій на коефіцієнт теплопровідності структур.

Методика розрахунків

Для розрахунку коефіцієнта теплопровідності k використовувався метод нерівноважної молекулярної динаміки з алгоритмом Мюллер-Плате. Деталі методу викладено в роботі [7]. Моделювана комірка складалась з кремнієвої матриці розмірами $10 \times 10 \times 100$ в одиницях сталої ґратки Si з нановключеннями Ge кубічної форми. Вказана структура спочатку витримувалась впродовж 10 нс при сталих температурі та тиску для релаксації внутрішніх напружень, після чого виконувався розрахунок теплопровідності k . Кожне значення k отримувалось шляхом усереднення результатів 10 незалежних моделювань. Всі розрахунки виконувались за допомогою програмного пакету молекулярної динаміки LAMMPS.

Результати та обговорення

На першому етапі роботи проводилось тестування потенціалів міжатомної взаємодії Стіллінджера-Вебера (SW) [8] та Терзоффа [9] на точність опису теплопровідності k монокристалічних Si та Ge. Результати МД-моделювання співставлялись з експериментальними залежностями $k(T)$, отриманими авторами роботи [10]. Як видно з рис.1, теоретичні значення k в усьому діапазоні досліджуваних температур лежать вище, ніж експериментальні. Це пов'язано з тим, що при моделюванні нами розглядався ідеальний кристал без жодних дефектів, тоді як реальні кристали завжди містять певну концентрацію точкових дефектів та дислокацій. Вказані фактори слугують джерелом додаткового розсіювання фононів, що зумовлює зниження коефіцієнта теплопровідності. З отриманої

залежності на рис.1 видно, що потенціал Терзоффа при однакових умовах дає краще узгодження теоретичної та експериментальної залежностей. Оскільки аналогічні результати були отримані і при моделюванні теплопровідності германію, то потенціал Терзоффа було обрано для моделювання SiGe гетероструктур з квантовими точками.

Розрахунок теплопровідності k гетероструктур SiGe в залежності від об'ємної частки η германієвих КТ виявив, що збільшення

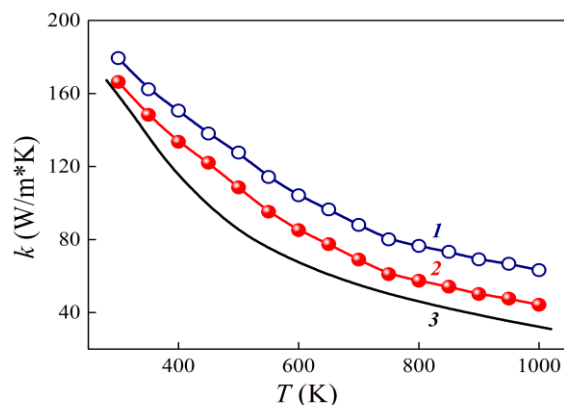


Рис. 1. Розрахована температурна залежність коефіцієнта теплопровідності кристалу Si з потенціалами SW (1) і Терзоффа (2) у порівнянні з експериментом (3) [10]

об'ємної частки Ge проявляється в різкому зменшенні коефіцієнта теплопровідності (рис.2). При подальшому зростанні η , величина k починає повільно зростати.

Різке зменшення k при збільшенні η можна пояснити збільшенням площі границь поділу, на яких відбувається розсіювання фононів. В той же

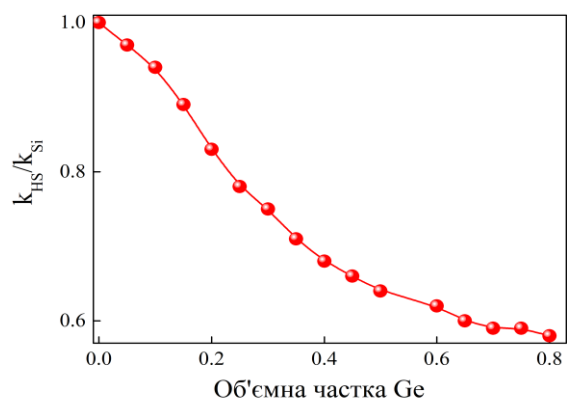


Рис. 2. Розрахована концентраційна залежність коефіцієнта теплопровідності SiGe гетероструктури з КТ при $T=300$ К

час, повільне зростання коефіцієнта k при подальшому зростанні частки КТ може бути пов'язане з формуванням неперервних

ланцюжків квантових точок, через які частина фононів поширюється без розсіювання.

На рис. 3 представлено результати розрахунку зміни відносної теплопровідності структури SiGe з об'ємною часткою КТ $\eta=0.5$ при $T=300$ К в залежності від величини і знаку одновісної деформації. Видно, що при одновісній деформації стиснення вздовж напрямку поширення тепла відбувається зниження теплопровідності структури, яке проявляється тим сильніше, чим більшою є деформація стиснення. Зі зміною знаку одновісної деформації, тобто при розтягу досліджуваного зразка, спостерігається зворотній ефект – зростання коефіцієнта теплопровідності.

На рис.4 представлено результати моделювання теплопровідності досліджуваної структури при дії гідростатичної деформації. Дія

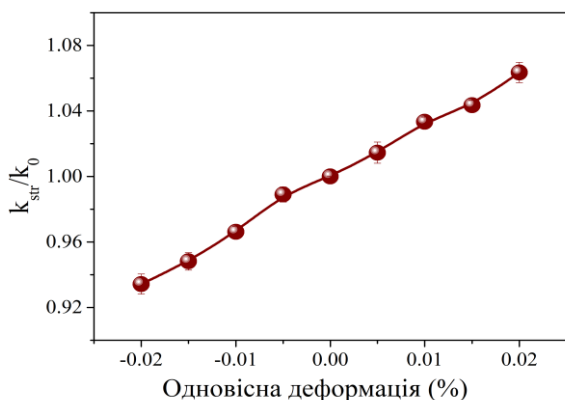


Рис. 3. Розрахована залежність коефіцієнта теплопровідності гетероструктури SiGe з КТ ($\eta=0.5$) під дією одновісної деформації

гідростатичної деформації стиснення проявляється в зростанні коефіцієнта теплопровідності матеріалу, тоді як всебічний розтяг досліджуваного композиту результується, навпаки, в зменшенні теплопровідності. Порівняння результатів, приведених на рис.3 та рис. 4 свідчить про те, що вплив одновісної та гідростатичної деформації на теплопровідність SiGe структури з квантовими точками при фіксованій об'ємній частці германієвих нановключень має протилежний характер.

Для пояснення деформаційних залежностей коефіцієнта теплопровідності k врахуємо, що величина k згідно кінетичної теорії визначається як $k=\lambda Cv/3$, де λ - довжина вільного пробігу фононів, v - їхня швидкість, C - теплоємність кристалу. При всебічному стисненні відстань між атомами зменшується, що веде до зростання жорсткості χ міжатомних зв'язків. Враховуючи,

що частота коливань ω атомів в кристалі пропорційна до величини χ , приходимо до висновку, що деформація всебічного стиснення зумовлюватиме зростання ω . Оскільки згідно теорії теплоємності величина $C \sim \omega$, то вказані ефекти зумовлюватимуть збільшення C , в результаті чого зростатиме і теплопровідність k матеріалу. Іншим фактором, що визначає зростання k при всебічному стисненні матеріалу є збільшення швидкості поздовжніх і поперечних фононів, спричинене зменшенням міжатомних відстаней. Ефект зменшення коефіцієнта теплопровідності при дії гідростатичного розтягу можна пояснити виходячи з аналогічних міркувань.

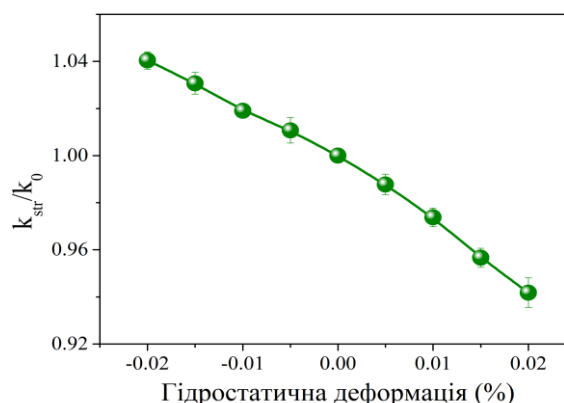


Рис. 4. Розрахована залежність коефіцієнта теплопровідності гетероструктури SiGe з КТ ($\eta=0.5$) під дією гідростатичної деформації

При поясненні впливу одновісної деформації на коефіцієнт теплопровідності гетероструктур врахуємо, що зміна розміру зразка в одному з напрямків веде до протилежної зміни двох інших розмірів. Тому при одновісному стисненні матеріалу, відстань між атомами в двох інших напрямках буде збільшуватись, зумовлюючи зменшення швидкості поширення поперечних фононів та зменшення теплоємності матеріалу. З урахуванням виразу для k це приводитиме і до зменшення коефіцієнта теплопровідності.

Висновки

Отже, отримані в роботі результати молекулярно-динамічного моделювання процесів теплоперенесення в SiGe гетероструктурах з квантовими точками демонструють можливість зниження коефіцієнта теплопровідності шляхом варіації об'ємного вмісту германієвих нановключень, а також можливість керованої зміни коефіцієнта теплопровідності за

допомогою зовнішньої деформації. Цей факт може бути використаний при проектуванні пристроїв на основі наноматеріалів, зокрема, термоелектричних перетворювачів підвищеної

енергоефективності на основі напівпровідникових гетероструктур.

Список використаних джерел

1. High quality multifold Ge/Si/Ge composite quantum dots for thermoelectric materials / [H.-T. Chang, C.-C. Wang, J.-C. Hsu та ін.] // *Appl.Phys.Lett.* – 2013. – 102(10). – С.101902-1 - 101902-5.
2. Nanostructured thermoelectrics / [P. Pichanusakorn, P. Bandaru] // *Mat.Sci.Eng.* – 2010. – R67 (2-4). – С. 19 - 63.
3. Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers / [G. Pernet, M. Stoffel, I. Savic, та ін.] // *Nature Materials.* – 2010. – 9 (6). – С.491 - 495.
4. Effects of vacancy defects and axial strain on thermal conductivity of silicon nanowires: A reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation / [M. Shahraki, Z. Zeinali] // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* – 2015. – 85 (1). – С.233 - 238.
5. Isotope and strain effects on thermal conductivity of silicon thin film / [Z. Yang, R. Feng, F. Su, та ін.] // *Physica E.* – 2014. – 64 (4). – С.204 - 210.
6. Tensile strains give rise to strong size effects for thermal conductivities of silicene, germanene and stanene / [Y. Kuang, L. Lindsay, Q. Shi, G. Zheng] // *Nanoscale.* – 2016. – 8 (1). – С.3760 - 3767.
7. Atomistic simulation of the thermal conductivity in amorphous SiO₂ matrix/Ge nanocrystal composites / [V. Kuryliuk, O. Korotchenkov] // *Physica E.* – 2017. – 88 (1). – С.228 - 234.
8. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon / [F. Stillinger, T. Weber] // *Phys. Rev. B* – 1985. – 31(8). – С.5262-5271.
9. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems / [J. Tersoff] // *Phys. Rev. B* – 1988. – 37(12). – С.6991-7000.
10. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point / [C. Glassbrenner, G. Slack] // *Phys. Rev.* – 1964. – 134 (4A). – С.A1058-A1069.

References

1. CHANG, H.-T., WANG, C.-C., HSU J.-C. et al. (2013) High quality multifold Ge/Si/Ge composite quantum dots for thermoelectric materials. *Appl.Phys.Lett.* 102 (10). p.101902-1 - 101902-5.
2. PICHANUSAKORN, P. & BANDARU, P. (2010) Nanostructured thermoelectrics. *Mat.Sci.Eng.* R67 (2-4). p.19 - 63.
3. PERNOT, G., STOFFEL, M., SAVIC, I., et al (2010) Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers. *Nature Materials.* 9 (6). p.491 - 495.
4. SHAHRAKI, M. & ZEINALI, Z. (2015) Effects of vacancy defects and axial strain on thermal conductivity of silicon nanowires: A reverse nonequilibrium molecular dynamics simulation. *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* 85 (1). p.233 - 238.
5. YANG, Z., FENG, R., SU, F., et al. (2014) Isotope and strain effects on thermal conductivity of silicon thin film. *Physica E.* 64 (4). p.204 - 210.
6. KUANG, Y., LINDSAY, L., SHI, Q., ZHENG G. (2016) Tensile strains give rise to strong size effects for thermal conductivities of silicene, germanene and stanene. *Nanoscale.* 8 (1). p.3760 - 3767.
7. KURYLIUK, V. & KOROTCHENKOV, O. (2017) Atomistic simulation of the thermal conductivity in amorphous SiO₂ matrix/Ge nanocrystal composites. *Physica E.* 88 (1). p.228 - 234.
8. STILLINGER, F. & WEBER, T. (1985) Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev.B.* 31 (8). p.5262-5271.
9. TERSOFF, J. (1988) New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. // *Phys. Rev.B.* 37 (12). p.6991-7000.
10. GLASSBRENNER, C. & SLACK, G. (1964) Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3°K to the Melting Point // *Phys. Rev.* 134 (4A). p.A1058-A1069.

Надійшла до редколегії 01.07.17