ФОНОННАЯ ИНЖЕНЕРИЯ В ОДНОМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

INGINERIA SUNETULUI ÎN NANOSTRUCTURILE UNIDIMENSIONALE

Калина ИСАКОВА, ORCID: 0000-0002-1456-7804
Александр КОЧЕМАСОВ, ORCID: 0000-0001-9963-3817
Денис НИКА, ORCID: 0000-0002-3082-3118
Молдавский государственный университет

CZU: 621.315.592

e-mail: isacova.calina@gmail.com

Фононная инженерия, или другими словами целенаправленное изменение фононных мод для получения желаемых тепловых [1-3], оптических [2] и электрических свойств [4-5], является эффективным инструментом для контроля теплового транспорта на наноуровне и активно исследуется различными группами ученых. Наноматериалы с высокой теплопроводностью могут быть использованы для отвода тепла [6-7], а наноматериалы с низкой теплопроводностью перспективны для термоэлектрических применений. Эффективность термоэлектриков характеризуется добротность термоэлектрика $ZT = S^2\sigma T/(\kappa_{ph} + \kappa_{el})$, где S коэффициент Зеебека, σ – электропроводность, T абсолютная температура, а κ_{ph} и κ_{el} фононная и электронная теплопроводность, соответственно. Акустические фононы являются основными переносчиками тепла в полупроводниковых объемных материалах при температурах от комнатной и выше. Было показано, что по сравнению с объемными материалами, наноструктуры предоставляют более широкие возможности для инженерии фононных, электропроводящих и теплопроводящих свойств. Изменение пространственных размеров, геометрических и структурных свойств позволяет существенно влиять на транспорт носителей заряда и фононов. В этом докладе представлен краткий обзор возможностей фононной инженерии в квазиодномерных структур на базе кремния: Si и Si/Ge нанонитей (НН), Si нанонитей с модулированным переменным сечением (МНН) и Si/SiO_2 нанотрубок (НТ).

Фононные спектры в кремниевых НН и МНН, рассчитанные в рамках модели Борна фон Кармана [8,9], представлены на Рисунке 1(а) и (б), соответственно.

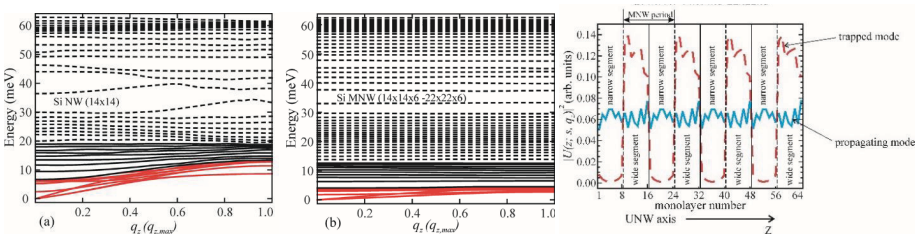


Рис. 1. Фононные спектры в кремниевых нанонитях и среднеквадратические смещения атомов [8]. **(а)** поперечное сечение нити 14 монослоев (МС) x 14 монослоев; **(б)** поперечное сечение узких сегментов нити 14 МС x 14 МС, широких - 22 МС x 22 МС, длина сегментов N_Z = 6МС; **(в)** красная линия – захваченная мода, синяя линия – общая мода

На Рисунке 2 показаны энергии фононов и одномерная плотность состояний для кремниевых НН (панель а) и НТ (панель б). Спектры акустических фононов в НН и НТ рассчитаны в рамках модели гранецентрированной решетки. Для спектров как МНН, так и НТ видно уплощение фононных мод по сравнению с гладкой кремниевой НН. В случае МНН это связано с выключением из теплового транспорта мод «захваченных» в узких сегментах НН (см. Рисунок 1(в)). В случае с НТ различие в скоростях акустических фононов, более сильному конфайнменту и перестройке спектра приводят к замедлению фононов. Как видно из одномерной плотности состояний, в НТ большая часть фононных мод сконцентрирована в области энергий 10-25 мэВ, а в НН моды сосредоточены в интервале более высоких энергий 20 – 30мэВ.

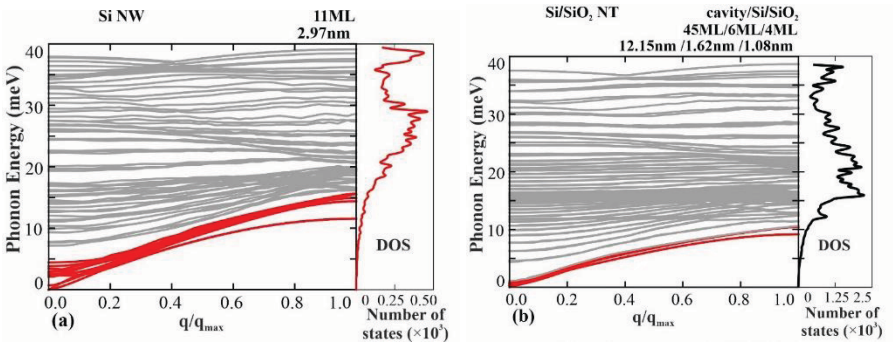


Рис. 2. Спектры акустических фононов и одномерная плотность состояний в Si НН и Si/SiO_2 НТ [10]. **(а)** НН: поперечное сечение 11 МС x 11 МС, **(б)** НТ: толщины Si и SiO_2 слоев 6 МС и 4 МС, соответственно, размер отверстия N_Z = 45 МС, количество Si/ SiO_2 оболочек N = 1

На Рисунке 3 представлены зависимости отношение теплопроводностей в Si/Ge СНН (а), отношение потоков в Si МНН (б) и теплопроводность в Si НН и Si/SiO_2 НТ (в). Из Рисунка 3(а) видно, что падение теплопроводности растет с тостом температур для различных поперечных сечений. Максимум обусловлен тем, что с ростом поперечного сечения растет и число фононных мод, несущих тепло, и падение теплопроводности становится не таким заметным. Отношение тепловых потоков в МНН (Рисунок 3(б)) показывает, что при температурах выше T =120 K падение теплового транспорта сильнее при большей разнице в ширине сегментов. С ростом температур высокоэнергетические моды оказываются захваченными в широких сегментах МНН, в отличие от обычной НН. Также с ростом температур увеличивается Umklapp рассеяние, что приводит к ещё большему снижению теплопроводности. Падение теплопроводности наблюдается и в случае НТ. Здесь падение связано, как с перестройкой фононных мод в результате акустического несоответствия материалов, так и с увеличением рассеяния на границах. Наши

исследования показали, что нанонити и нанотрубки на базе кремния являются перспективными структурами для фононной инженерии: в зависимости от их геометрических и материальных параметров можно достичь падения теплопроводности в 3-8 раз [8-10].

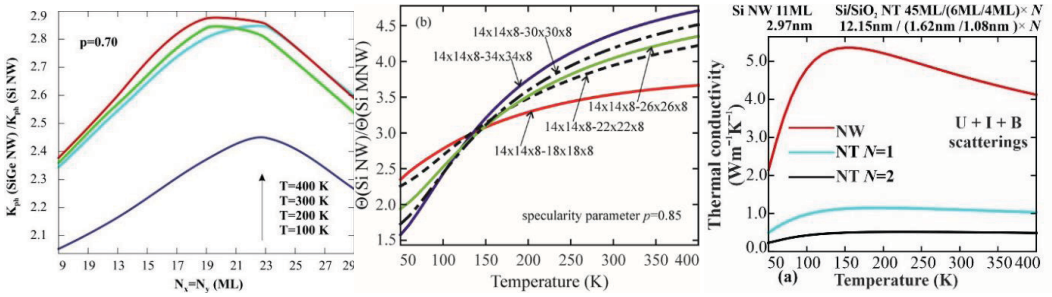


Рис. 3. Тепловой транспорт в одномерных Si наноструктурах. **(а)** [9] Отношение теплопроводности для Si/Ge СНН в зависимости от поперечного сечения при разных температурах; **(б)** [8] Отношение тепловых потоков гладкой и модулированных НН; **(в)** [10] Теплопроводность в НН и НТ: красная линия – НН, синяя и черная Si/SiO_2 НТ-и с N = 1 и N = 2 оболочками, соответственно.

Литература:

1. BALANDIN, A.A., NIKA, D.L. Phononics in Low-Dimensional Materials. *Mater. Today.* 2012, 15, pp. 266–275, doi:10.1016/S1369-7021(12)70117-7.
2. BALANDIN, A.A. Nanophononics: Phonon Engineering in Nanostructures and Nanodevices. In: *J. Nanosci. Nanotechnol.* 2005, *5*, pp. 1015–1022, doi:10.1166/jnn.2005.175.
3. COCEMASOV, A.I., ISACOVA, C.I., NIKA, D.L. Thermal Transport in Semiconductor Nanostructures, Graphene, and Related Two-Dimensional Materials. In: *Chin. Phys.* 2018, 27, pp. 56301, doi:10.1088/1674-1056/27/5/056301.
4. SAFAVI-NAEINI, A.H., Van THOURHOUT, D., BAETS, R., Van LAER, R. Controlling Phonons and Photons at the Wavelength Scale: Integrated Photonics Meets Integrated Phononics. In: *Optica.* 2019, 6, pp. 213-232, doi:10.1364/OPTICA.6.000213.
5. NIKA, D.L., POKATILOV, E.P., FOMIN, V.M., DEVREESE, J.T., TEMPERE, J. Resonant Terahertz Light Absorption by Virtue of Tunable Hybrid Interface Phonon–Plasmon Modes in Semiconductor Nanoshells. In: *Appl. Sci.* 2019, 9, p. 1442, doi:10.3390/app9071442.
6. GHOSH, S., BAO, W., NIKA, D.L., SUBRINA, S., POKATILOV, E.P., LAU, C.N., BALANDIN, A.A. Dimensional Crossover of Thermal Transport in Few-Layer Graphene. In: *Nat. Mater.* 2010, 9, pp. 555–558, doi:10.1038/nmat2753.

7. KO, G., KIM, J. Semiconductor Devices, Materials, and Processing-Thermal Modeling of Graphene Layer on the Peak Channel Temperature of AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistors. *IEEE-ECS Electrochem. Solid State Lett.* 2009, 12, H29, doi:10.1149/1.3023032.
8. COCEMASOV, A.I., ISACOVA, C.I., NIKA, D.L. Thermal Transport in Semiconductor Nanostructures, Graphene, and Related Two-Dimensional Materials. Chin. Phys. B 2018, 27, pp. 56301, doi:10.1088/1674-1056/27/5/056301.
9. ИСАКОВА, К., ЗИНЧЕНКО, Н., НИКА, Д. Фононные моды и решеточная теплопроводность в сегментированных нанонитях и в нанонитях покрытых оболочкой. In: Canțer, V.; Paladi, F.; Nica, D., eds. Progrese în fizica teoretică. Editura: CEP USM, Chișinău, 2016, pp. 325-357. ISBN: 978-9975-71-817-2.
10. ISACOVA, C., COCEMASOV, A. NIKA, D., FOMIN, V. Phonons and Thermal Transport in Si/SiO_2 Multishell Nanotubes: Atomistic Study Sci. 2021, 11(8), 3419; https://doi.org/10.3390/app11083419

Представленные результаты были получены в рамках исследовательского проекта: 20.80009.5007.02 „Materiale nanostructurate avansate pentru aplicații termoelectrice și senzori”.