ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ МОЛДОВЫ

На правах рукописи

УДК: 539.21

АСКЕРОВ АРТУР

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ “VALENCE FORCE FIELD” ДЛЯ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР И ГРАФЕНОВЫХ СЛОЁВ: ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ФОНОНОВ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

131.04 - ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физических наук

КИШИНЁВ, 2023

Диссертация выполнена в лаборатории «Физика и инженерия наноматериалов имени Е. Покатилова» Государственного Университета Молдовы.

Научный руководитель:
Покатилов Е. П., доктор хабилитат физ.-мат. наук, профессор, член-корреспондент Академии Наук Молдовы;

Научный консультант:
Ника Д. Л., доктор хабилитат физических наук, конференциар;

Официальные оппоненты:
ТРОНЧУ Василий– доктор хабилитат физ.-мат. наук, профессор, Технический Университет Молдовы;
КОНОПКО Леонид – доктор хабилитат физ.-мат. наук, конференциар, Институт Электронной Инженерии и Нанотехнологий имени Д. Гицу, Технический Университет Молдовы.

Состав Специализированного Учёного Совета:
ОСТРОВСКИЙ Сергей – *председатель*, доктор хабилитат физ.-мат. наук, конференциар, Институт Прикладной Физики, Государственный Университет Молдовы;
КОЧЕМАСОВ Александр – *научный секретарь*, доктор физических наук, конференциар, Государственный Университет Молдовы;
МАКОВЕЙ Михай – доктор хабилитат физ.-мат. наук, конференциар, Институт Прикладной Физики, Государственный Университет Молдовы;
КЛЮКАНОВ Александр – доктор хабилитат физ.-мат. наук, профессор, Государственный Университет Молдовы;
СИДОРЕНКО Анатолий – доктор хабилитат физ.-мат. наук, профессор, академик Академии Наук Молдовы, Институт Электронной Инженерии и Нанотехнологий имени Д. Гицу, Технический Университет Молдовы.

Защита состоится **28 мая 2024**, в **15.00** на заседании Специализированного Научного Совета D 131.04-23-86 при Государственном Университете Молдовы по адресу: улица А. Матеевича, 60, корпус 4, каб. 222, Кишинёв, MD-2009, Республика Молдова.

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в библиотеке Государственного Университета Молдовы (ул. А. Матеевича, 60, корпус 4, Кишинёв, MD-2009, Республика Молдова) и на сайте ANACEC (www.anacec.md).

Автореферат был разослан _____.

Научный секретарь Специализированного Учёного Совета,
КОЧЕМАСОВ Александр, доктор физ. наук, конференциар _____

Научный консультант:
НИКА Денис, доктор хаб. физ.-мат. наук, конференциар _____

Автор:
АСКЕРОВ Артур _____

© Аскеров Артур, 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ 4
СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ 8
ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ 23
БИБЛИОГРАФИЯ 26
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ 28
ADNOTARE 30
АННОТАЦИЯ 31
SUMMARY 32

КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Бурное развитие микро- и наноэлектроники последних лет стимулирует исследования физических свойств различных наноразмерных структур: нанослоев, нанонитей, квантовых точек и сверхрешёток из них [1-10].

Пространственный конфайнмент фононов в наноструктурах сильно влияет как на их энергии и групповые скорости, так и на плотность фононных состояний [5-6]. Экспериментально показано, что теплопроводность кремниевых нанослоев и нанонитей с пространственными размерами в несколько нанометров в 10 – 15 раз меньше, чем в объемном кремнии [7-8]. Сильное падение теплопроводности объясняется как дополнительным рассеянием фононов на границах наноструктур (этого рассеяния нет в объемном материале), так и образованием фононных мод, свойства которых отличаются от свойств фононов объемного материала.

Наноматериалы с низкой теплопроводностью и достаточно хорошей электропроводностью могут быть перспективными для термоэлектрических применений, в то время как наноматериалы с высокой теплопроводностью необходимы для отвода избыточного тепла от горячих точек современных электронных чипов. Поэтому поиск новых наноматериалов как с высокой, так и с низкой теплопроводностью продолжает оставаться актуальным. Основными переносчиками тепла во многих полупроводниковых наноструктурах являются акустические фононы. Влияя на свойства акустических фононов и на условия их распространения можно понижать или повышать решёточную теплопроводность наноструктуры.

В диссертационной работе была развита динамическая модель полей валентных сил (valence-force-field (VFF) модель) для исследования фононных свойств и теплопроводности кремниевых и германиевых нанослоев, трехслойных Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge наноструктур, а также графена. Графен был выбран для исследования как материал с уникальными, рекордно – высокими значениями теплопроводности в пределах 3000 $\frac{\text{Вт}}{\text{м К}}$ – 5000 $\frac{\text{Вт}}{\text{м К}}$ [1, 5] при температуре T = 300 К.

Цели исследований:

- Развитие модели “Valence Force Field” для изучения фононных состояний в алмазоподобных гетероструктурах (в гетероструктурах на основе Si/Ge), в однослойном и многослойном графене и в графеновых нанолентах;
- Развитие модели теплового транспорта и теоретическое изучение решёточной теплопроводности в графене и плоских гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge.

Гипотезы исследований (положения, выносимые на защиту):

- В трехслойных гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge и квантоворточечных сверхрешётках Si/Ge появляются новые типы фононных мод: германий-подобные (когда, в основном, колеблются только атомы германиевых областей), кремний-подобные (когда, в основном, колеблются только атомы кремниевых областей) или гетероструктурные (когда колеблются атомы и кремниевых и германиевых областей).
- Поверхностное рассеяние фононов сильно влияет на решёточную теплопроводность трехслойных Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge гетероструктур с нанометровыми толщинами слоев. При уменьшении параметра поверхностного рассеяния с $p = 0.9$ до $p = 0$ теплопроводность падает ~ в 10 раз во всём интервале температур 50 К – 400 К.
- В графеновых нанолентах происходит расщепление энергетического спектра фононов благодаря их конфайнменту, в направлении перпендикулярном оси наноленты.
- В двухслойном и трехслойном графене слабое взаимодействие между слоями приводит к небольшому расщеплению энергетического спектра всех фононных ветвей вблизи зоны Бриллюэна.
- Решёточная теплопроводность графеновых пленок в 2 – 3 раза превышает решёточную теплопроводность графита и сильно зависит от ширины плёнки. При температуре $T = 300$ К изменение ширины от 5 мкм до 50 мкм ведет к увеличению теплопроводности на ~ 1000 $\frac{\text{Вт}}{\text{м К}}$.

Методология исследований

1. *Модель “Valence-force-field” для теоретического изучения фононных состояний*;
2. *Кинетическое уравнение Больцмана и приближение времен релаксации фононов при моделировании решёточной теплопроводности;*
3. *Диаграммная техника для учёта всех возможных трёхфононных процессов в графене;*

4. *Формализм теплового потока при выводе коэффициента теплопроводности;*
5. *Методы численного интегрирования для расчета двойных и тройных интегралов (в том числе и криволинейных).*

Научная новизна диссертационной работы связана с подробным теоретическим исследованием фононных состояний и теплопроводности в наноструктурах на базе кремния и германия, а также в графеновых пленках и нанолентах. Были получены следующие новые результаты:

- Решёточная теплопроводность в гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge со слоями нанометровой толщины сильно зависит как от толщины слоёв, так и от шероховатости их поверхностей, вследствие сильного влияния поверхностного рассеяния;
- Температурные зависимости теплопроводности в гетероструктурах демонстрируют максимум, который может быть более или менее выражен в зависимости от толщин и материала слоев гетероструктур, а также от интенсивности поверхностного рассеяния фононов;
- Графен демонстрирует высокие значения решёточной теплопроводности из-за достаточно слабого (по сравнению с другими полупроводниковыми материалами) рассеяния фононов;
- В двухслойном и трехслойном графене появляется расщепление дисперсионных кривых фононов вблизи центра зоны Бриллюэна, которое вызвано пространственным конфайнментом фононов вдоль Z-направления;

Структура диссертационной работы

Диссертационная работа состоит из Введения, трёх Глав, Общих выводов и рекомендаций. Диссертация включает 145 ссылок на библиографические источники, 134 страницы, 70 рисунков и 159 формул.

Апробация результатов

Результаты диссертации были представлены в рамках 9 национальных и международных конференций:

- 1st *International Scientific and Technological Conference "Radio electronics, Informatics, Technology*" *ICRIT 2008*, 15-16 October 2008, Chisinau, Moldova;
- *5th International Conference on "Microelectronics and Computer Science"*, September 19-21, 2007, Chisinau, Moldova;

- *XIth International Young Scientists' Conference on Applied Physics*, June 15-18, 2011, Kyiv, Ukraine;
- *XVII Республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика Конденсированного Состояния»,* 16 – 17 Апреля, 2009, Гродно, Беларусь;
- *8th International Conference on Materials Science and Condensed Mater Physics, MSCMP-2018*, September 25-28, 2018, Chişinău, Moldova;
- *4th International Conference "Material Science and Condense Matter Physics",* 23-25 September, 2008, Chisinau, Republic of Moldova;
- *5th International Conference of Young Researchers*, November 9, 2007, Chişinău, Moldova*;*
- *Conferinţa Ştiinţifică Internaţională dedicată Jubileului de 60 ani ai Universităţii de Stat din Moldova*, 2006, Chişinău, Moldova;
- *Conferința științifică națională cu participarea internațională „Integrarea prin cercetare și inovare"*, 28-29 septembrie 2016;
- *Conferinţa Ştiinţifică a Masteranzilor Şi Doctoranzilor, "Cercetare şi Inovare-Perspective de Evoluţie şi Integrare Europeană"*, 23 septembrie, 2009. Chisinau, Moldova;

Публикации

Результаты диссертационной работы опубликованы в **20** публикациях, включая **3** статьи в международных журналах с импакт фактором и **6** тезисов на международных конференциях; 3 статьи и 3 тезиса были опубликованы без соавторов.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В первой главе диссертации представлен обзор научных результатов, полученных при исследовании фононных свойств полупроводниковых наноразмерных структур и графена. Описаны различные теоретические модели, используемые при изучении фононных мод и фононных процессов: континуальный подход и решёточные модели колебаний кристаллической решётки (FCC – модель, VFF - модель, модель заряженных связей, модель заряженных оболочек, модель Борна-фон-Кармана и модель с межатомными потенциалами, зависящими от окружающей среды). Установлено, что несмотря на интенсивные исследования, которые проводятся в данной области, развитие решёточных моделей фононных состояний по-прежнему является актуальной задачей. Основываясь на проведенном анализе моделей и полученных результатов формулируются основные цели диссертационной работы.

Вторая глава диссертации посвящена теоретическому изучению фононных мод плоских гетероструктур Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge, а также квантоворточечных сверхрешёток Si/Ge. В рамках модели “Valence Force Field” выводятся уравнения движения атомов, исследуемых наноструктур и проводится классификация фононных мод в гетероструктурах и сверхрешётках. Используемая “Valence Force Field” модель построена на основе динамических уравнений, записанных в гармоническом приближении. Учитывалось взаимодействия атома с ближайшими (1-я сфера) и более дальними (2-я сфера) атомами (см. Рис. 1). Атомы, составляющие первую сферу (4 атома), находятся на наименьшем расстоянии от центрального атома. Атомы, составляющие вторую сферу, это наиболее близкие атомы, из не вошедших в первую сферу (12 атомов). Использовались радиальные и угловые двух – и трёхчастичечные взаимодействия.

Элементарная ячейка алмазоподобной кристаллической решётки представляет собой параллелепипед, построенный на трансляционных векторах решётки. Элементарная ячейка содержит в себе два атома. Общие уравнения движения для двух атомов из элементарной ячейки образуют систему из 6 уравнений (первая и вторая атомные сферы):

$$\begin{aligned} M\omega^2 u_\alpha(\vec{q},1) &= \sum_\beta \left(D^I_{\alpha\beta}(1,1) + D^{II}_{\alpha\beta}(\vec{q},1,1) \right) u_\beta(\vec{q},1) + \sum_\beta D^I_{\alpha\beta}(\vec{q},1,\bar{1}) u_\beta(\vec{q},\bar{1}) \\ M\omega^2 u_\alpha(\vec{q},\bar{1}) &= \sum_\beta D^I_{\alpha\beta}(\vec{q},\bar{1},1) u_\beta(\vec{q},1) + \sum_\beta \left(D^I_{\alpha\beta}(\bar{1},\bar{1}) + D^{II}_{\alpha\beta}(\vec{q},\bar{1},\bar{1}) \right) u_\beta(\vec{q},\bar{1}) \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$D^I_{\alpha\beta}(1,1) \equiv -\sum_{\bar{i}=\bar{1},\bar{2},\bar{3},\bar{4}} \Phi^I_{\alpha\beta}(\bar{i},1); \quad D^I_{\alpha\beta}(\vec{q},1,\bar{1}) \equiv \sum_{\bar{i}=\bar{1},\bar{2},\bar{3},\bar{4}} \Phi^I_{\alpha\beta}(\bar{i},1)e^{i\vec{q}\vec{n}(\bar{i},1)}$$
$$D^I_{\alpha\beta}(\bar{1},\bar{1}) \equiv -\sum_{i=1,2,3,4} \Phi^I_{\alpha\beta}(i,\bar{1}); \quad D^I_{\alpha\beta}(\vec{q},\bar{1},1) \equiv \sum_{i=1,2,3,4} \Phi^I_{\alpha\beta}(i,\bar{1})e^{i\vec{q}\vec{n}(i,\bar{1})} \qquad (2)$$

$$D^{II}_{\alpha\beta}(\vec{q},1,1) = \sum_{i=2..13} \Phi^{II}_{\alpha\beta}(i,1)(e^{i\vec{q}\vec{n}(i)} - 1);$$
$$D^{II}_{\alpha\beta}(\vec{q},\bar{1},\bar{1}) = \sum_{\bar{i}=\bar{2}..\bar{13}} \Phi^{II}_{\alpha\beta}(\bar{i},\bar{1})(e^{i\vec{q}\vec{n}(\bar{i})} - 1) \qquad (3)$$

$D^I_{\alpha\beta}$ и $D^{II}_{\alpha\beta}$ - это динамические матрицы первой и второй атомных сфер, $\Phi_{\alpha\beta}(i,j) \equiv \dfrac{\partial^2 V}{\partial u_\alpha(j)\partial u_\beta(i)}$ - силовые константы, V - полная потенциальная энергия взаимодействия атомов, номера атомов $i = 1,2,3,4$ для 1-й сферы окружения, $i = 5,...,13$ для 2-й сферы окружения, а индексы $\alpha, \beta = x, y, z$.

Система линейных уравнений (1) описывает движение атомов. Это задача на собственные вектора/собственные значения. Решая полученную систему уравнений, получаем собственные значения – энергии фононов, и собственные вектора – амплитуды колебаний атомов. Для получения дисперсий задача на собственные значения решалась для разных точек по q.

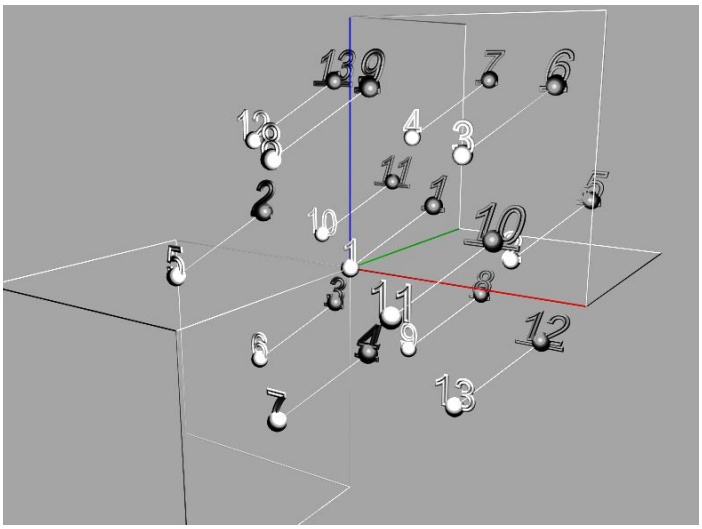


Рис. 1. Нумерация атомов первой и второй сферы.

Для расчёта дисперсионных кривых использовались: stretching, bending, stretching-stretching и stretching-bending межатомные взаимодействия, которые описывались через силовые константы. Полную потенциальную энергию взаимодействия V можно записать

как сумму потенциальных энергий этих дву- и трехчастичных межатомных взаимодействий:

$$V = V^r + V^b + V^{rr} + V^{r\vartheta} \tag{4}$$

где V^r - потенциальная энергия stretching - взаимодействия, V^b - потенциальная энергия bending - взаимодействия, V^{rr} - потенциальная энергия stretching – stretching - взаимодействия, $V^{r\vartheta}$ - потенциальная энергия stretching- bending - взаимодействия.

В случае stretching – взаимодействия, когда соседний атом движется по прямой, соединяющей его с центральным атомом, потенциальная энергия stretching-связи V^r имеет вид:

$$V^r = \frac{1}{2}\sum_{i,j} \kappa_r \left(\delta r_{ij}\right)^2 \tag{5}$$

где κ_r - это константа stretching – взаимодействия, а δr_{ij} - это удлинение связи между атомами.

В случае bending – взаимодействия, когда изменяется угол между двумя связями, образованными центральным атомом и двумя соседними атомами, потенциальная энергия bending -связи V^b имеет вид:

$$V^b = \frac{\kappa_\vartheta r^{02}}{2} \sum_{j,\neq i,k} (\delta\vartheta_{ijk})^2 \tag{6}$$

где κ_ϑ - это константа bending – взаимодействия, r^0 - расстояние между атомами связей в состоянии равновесия, $\delta\vartheta_{ijk}$ - это угол между связями атомов $(i, j),(k, j)$.

Bending-взаимодействие – это трёхчастичечное взаимодействие, описывающее изгиб угла. Энергия взаимодействия двух частиц (i, j), зависит от положения третьей частицы (k,j) и выражается через угол, который образуют атомы.

В случае stretching – stretching взаимодействия, когда изменяется длинна двух связей, образованных центральным атомом и двумя соседними атомами, а угол между ними постоянен, потенциальная энергия stretching - stretching связи V^{rr} имеет вид:

$$V^{rr} = \kappa_{rr} \sum_{\bar{i}\neq\bar{k}} \delta r_{\bar{i}\bar{j}} \delta r_{\bar{k}\bar{j}} \tag{7}$$

где κ_{rr} - это константа stretching – stretching взаимодействия, а $\delta r_{\bar{i}\bar{j}}$ и $\delta r_{\bar{k}\bar{j}}$ - это удлинения связи между атомами.

В случае stretching - bending – взаимодействия, когда меняется как угол образованный атомами, так и расстояние до одного из них, потенциальная энергия stretching- bending -связи $V^{r,\vartheta}$ имеет вид:

$$V^{r,\vartheta} = r^0 \kappa_{r,\vartheta} \sum_{ijk} (\delta r_{ij})(\delta \vartheta_{ijk}) \qquad (8)$$

где r^0 - расстояние между атомами связей в состоянии равновесия, $\kappa_{r,\vartheta}$ - это константа stretching - bending – взаимодействия, δr_{ij} - это удлинение связи между атомами, $\delta \vartheta_{ijk}$ - это угол между связями атомов $(i, j), (k, j)$.

Дисперсии фононов, полученные в рамках VFF модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными (см. Рис. 2).

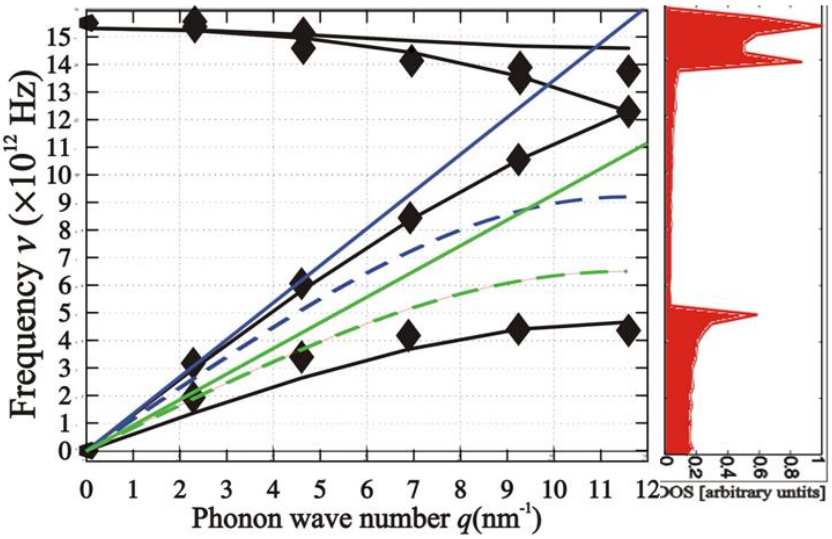


Рис. 2. Сравнение результатов расчёта дисперсионных кривых в объёмном кремнии в рамках VFF модели (сплошные чёрные линии) с данными эксперимента (чёрные ромбы) для кристаллографического направление q[1, 0, 0]. Для сравнения приведены результаты расчёта в континуальной и FCC моделях. Ветви континуальной модели показаны прямыми линиями зелёного цвета (TA) и синего цвета (LA). Ветви FCC модели показаны пунктирными линиями зелёного цвета (TA) и синего цвета (LA). Справа показана DOS.

Как видно, VFF модель позволяет рассчитать, как акустические ветви колебаний, начинающиеся с нуля, так и оптические ветви, не равные 0 при q=0. В континуальной и FCC моделях оптические ветви отсутствуют (это следствие упрощений, сделанных в этих моделях). Учёт оптических колебаний уточняет и дополняет модель, поскольку оптика проявляется при многофононном рассеянии и участвует в явлениях, лежащих в основе

рамановской спектроскопии. По дисперсиям была рассчитана плотность состояний. Видны острые пики у DOS.

На Рис. 3 показаны дисперсии, полученные для пластины кремния состоящей из 18 атомных плоскостей. Сильное расщепление дисперсионных кривых, по сравнению с объёмным случаем, связано с пространственным конфайнментом фононов вдоль оси *Z*. В плоскости XY нанослой считается формально бесконечным. Нижний пучок - акустические моды, верхний – оптические моды, в середине - акустико-оптические моды.

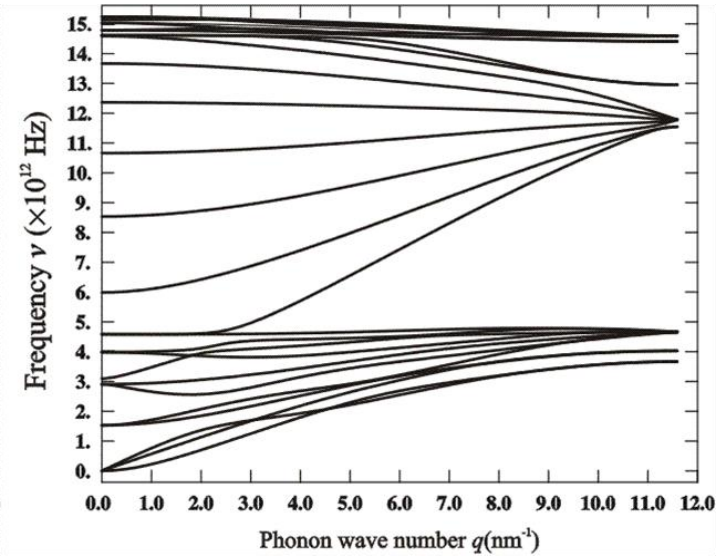


Рис. 3. Дисперсии частоты фононов в нанослое из кремния толщиной в 18 атомных слоев. Кристаллографическое направление [1, 0, 0].

Комбинируя атомные слои из разных материалов, были сконструированы плоские гетероструктуры. Были посчитаны дисперсии для гетероструктур Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge каждый слой которых был толщиной по 6 атомных плоскостей. На Рис. 4 показаны дисперсии и плотности состояний для плоской гетероструктуры Si/Ge/Si. На DOS видны максимумы: при высоких частотах эти максимумы связаны с модами кремния, а при промежуточных частотах - с оптическими модами германия. По сравнению с объёмом DOS выглядит более равномерно.

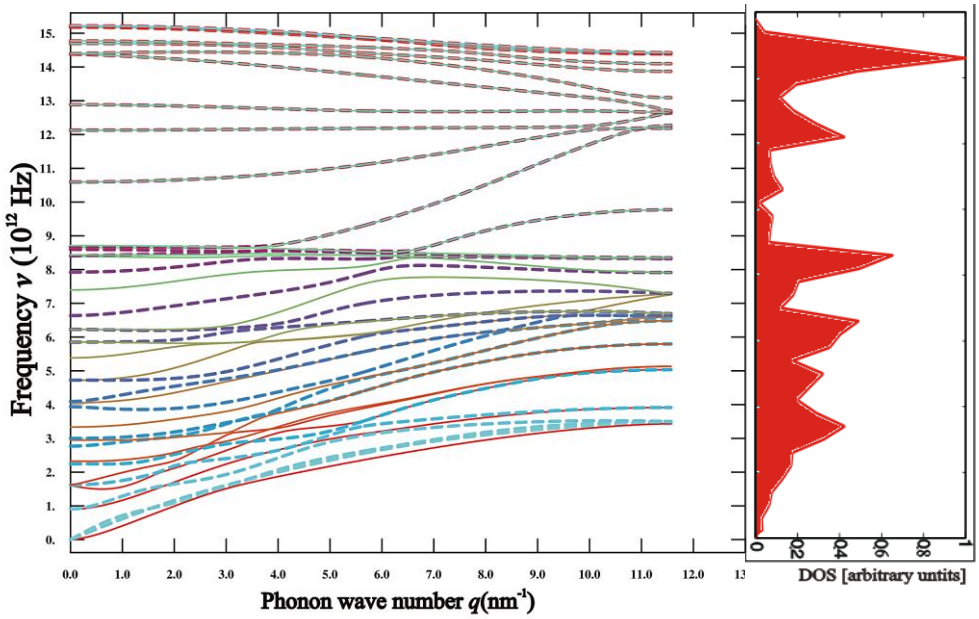


Рис. 4. Дисперсионные кривые полученные в рамках VFF-модели для плоской гетероструктуры Si-Ge-Si

Результаты расчёта фононных мод для квантоточечной сверхрешётки из кремния и германия, используя VFF модель, показаны на Рис. 5.

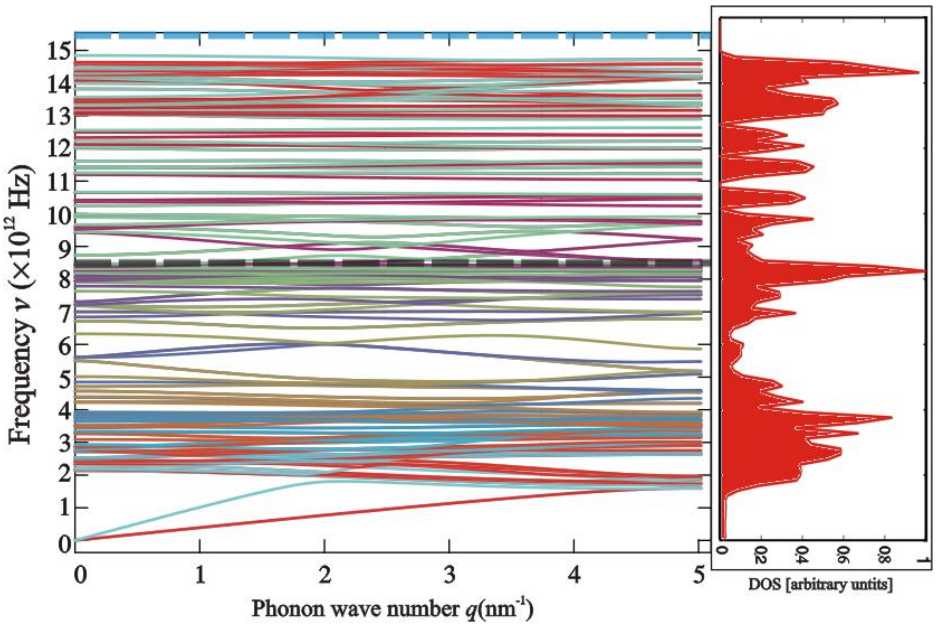


Рис. 5. Дисперсионные кривые, полученные в рамках VFF-модели, для сверхрешётки. Кубический трансляционный элемент. Внутренняя область - 0.813 нм из Ge, внешняя область - 1.084нм, из Si. Кристаллографическое направление [1, 1, 1].

На дисперсиях сверхрешёток, как и в случае плоских структур, видно сильное расщепление спектра. На графиках DOS видны щели, но DOS более равномерно

распределена по энергиям, чем в объёме и слоях. Видны пики, соответствующие оптическим модам германия и кремния.

Показано, что в гетероструктурах и сверхрешётках на основе кремния и германия появляется три вида фононных мод: (1) кремний-подобные моды, колебания которых сосредоточены в кремниевых слоях/квантовых точках; (2) германий-подобные моды, колебания которых сосредоточены в германиевых слоях/германиевой матрице и общие (гетероструктурные) моды, колебания которых происходят и в кремниевом и в германиевом материале. Появление аналогичных гетероструктурных мод было теоретически предсказано для трехслойных AlN/GaN/AlN гетероструктур в рамках континуальной модели [11].

Полученные дисперсионные спектры были использованы для расчёта теплопроводности в плоских гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge и для изучения зависимости теплопроводности от температуры, толщины слоев и шероховатости их поверхности. Расчёт был проведен, используя уравнение Больцмана в приближении времени релаксации. Тепловой поток в плоской структуре может быть вычислен согласно следующему выражению [12 - 14].

$$\vec{J} = \sum_{s,\vec{q}} N_s(q) \cdot \vec{v}_s(q) \cdot \hbar\omega_s(q) \tag{9}$$

где s - это номер фононной ветви, $\vec{v}_s(q) \cdot \hbar\omega_s(q)$ - поток энергии переносимый одним фононом, $\vec{v}_s(q) = \dfrac{\partial \omega_s(q)}{\partial q}$ - групповая скорость фонона, $N_s(q)$ - это неравновесная функция количества фононов в потоке.

Переходя в (9) от суммирования к интегрированию по $\vec{q}$ и произведя некоторые преобразования, получим формулу теплопроводности k_{ph} в плоской структуре:

$$k_{ph} = \frac{1}{4\pi d\, k_B T^2} \sum_s \left(\int_0^{q_{\max}} \left(\hbar\omega_s(q)\right)^2 \cdot \left(\frac{\partial \omega_s(q)}{\partial q}\right)^2 \cdot \tau\left(\omega_s(q)\right) \cdot \frac{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\dfrac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} q\,dq \right) \tag{10}$$

Тепловой поток через пластину равен

$$W_{ph} = k_{ph} \cdot d \tag{11}$$

Из формул (10) и (11) получаем выражение для теплового потока через плоскую пластину толщиной d

$$W_{ph} = \frac{1}{4\pi\, k_B T^2} \sum_s \left(\int_0^{q_{\max}} \left(\hbar\omega_s(q)\right)^2 \cdot \left(\frac{\partial\omega_s(q)}{\partial q}\right)^2 \cdot \tau\left(\omega_s(q)\right) \cdot \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T}\right)-1\right)^2} q\,dq \right) \quad (12)$$

При расчёте теплопроводности учитывались два механизма рассеяния фононов: фонон – фононное рассеяние (Umklapp – рассеяние) (13) и поверхностное рассеяние (14), причиной которого являются несовершенства поверхностей плоских структур [15-19]. Скорость Umklapp – рассеяние фононов $\frac{1}{\tau_U}$ описывается формулой:

$$\frac{1}{\tau_U} = 2\gamma^2 \frac{k_B T}{M \langle\nu\rangle^2} \frac{\left(\omega_s(q)\right)^2}{\omega_{\max}} \quad (13)$$

где γ - параметр Грюнайзена, M - масса атома, $\langle\nu\rangle$ - средняя скорость звука, $\omega_{\max}$ - максимальное значение круговой частоты, в объёмном случае $\omega_{\max}$ практически равна частоте Дебая $\omega_D = q_D \cdot c_{sound}$ (q_D-радиус зоны Брюллиена, ν_{sound} - скорость звука в объёме).

Скорость поверхностного рассеяния фононов $\frac{1}{\tau_B}$ имеет вид:

$$\frac{1}{\tau_B} = \frac{\nu_s(q)}{d} \frac{1-p}{1+p} \quad (14)$$

Где p – это параметр зеркальности, характеризующий гладкость поверхности в процессах рассеяния на ней фононов (может принимать значения от 0 до 1). Чем выше значение p, тем более гладкой является и тем слабее рассеиваются фононов.

Полная скорость рассеяния фононов находится по правилу Матиссена:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_B} \quad (15)$$

На Рис. 6 показана зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины d для разных значений параметра поверхностного рассеяния p при комнатной температуре. С ростом толщины пластины теплопроводность растёт.

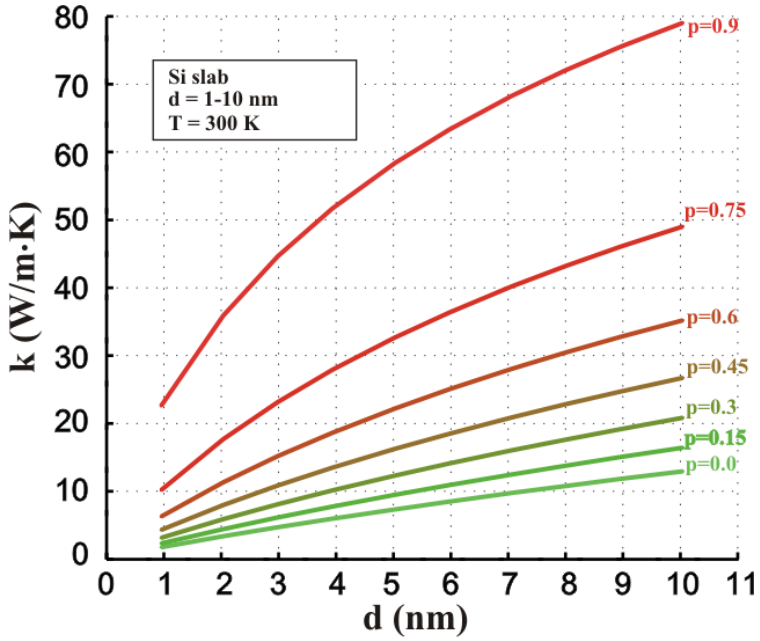


Рис. 6. Зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины для разных значений параметра поверхностного рассеяния фононов *p*.

На Рис. 7 изображена зависимость теплопроводности пластины из кремния от её толщины для разных значений абсолютной температуры. Параметр поверхностного рассеяния фононов p = 0.8. С ростом толщины пластины теплопроводность также растёт.

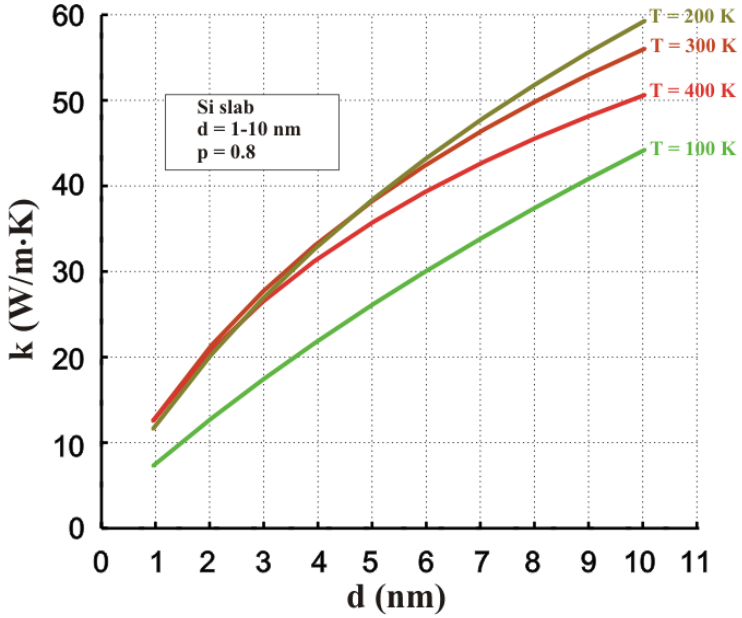


Рис. 7. Зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины для разных значений абсолютной температуры.

На Рис. 8 показаны зависимости теплопроводности от абсолютной температуры в плоских слоях кремния толщиной 3 нм и 9 нм и гетероструктуре на основе кремния

(Si/Ge/Si) толщиной 9 нм. Расчёты проводились для двух значений параметра поверхностного рассеяния p=0 и p=0.9.

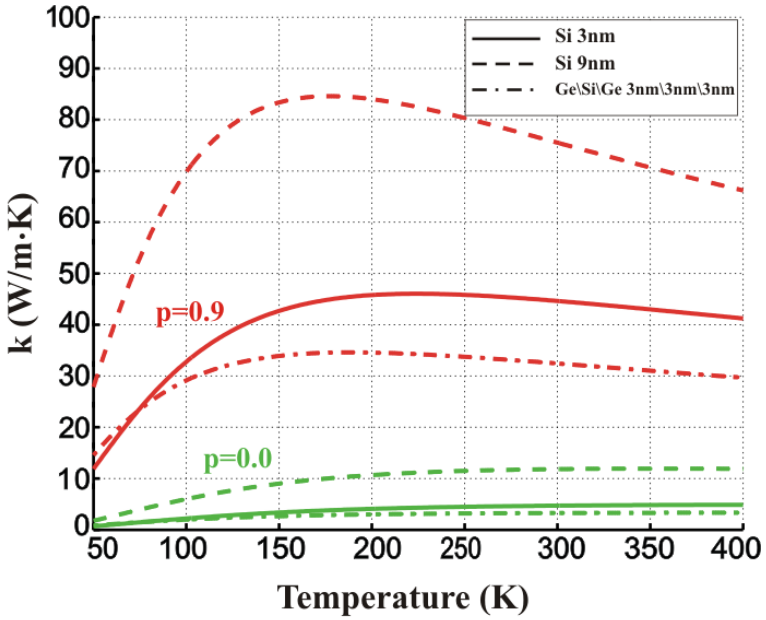


Рис. 8. Зависимость теплопроводности от абсолютной температуры для разных значений параметра поверхностного рассеяния *p*. Гетероструктура на основе кремния.

Толщина внутреннего слоя германия в гетероструктуре и толщины кремниевых обкладок равны 3 нм. Теплопроводность гетероструктуры толщиной 9 нм меньше теплопроводности пластин кремния толщиной 9 нм и 3 нм. Это связано с гибридизацией фононных мод в гетероструктурах. Скорость звука в Ge меньше чем в Si, поэтому скорость распространения фононных мод в гетероструктуре оказывается меньше, чем в кремниевых пластинах. Поэтому происходит падение теплопроводности в гетероструктуре по сравнению с пластиной кремния такой же толщины, но без обкладок.

Было установлено, что решёточная теплопроводность в гетероструктурах со слоями нанометровой толщины сильно зависит как от толщины слоев, так и от шероховатости их поверхностей, и в 3 – 15 раз меньше, чем теплопроводность объемного кремния при T = 300 К.

В третьей главе диссертации проведено теоретическое исследование фононных свойств однослойного, двухслойного и трехслойного графена и графеновых нанолент, а также решёточной теплопроводности графеновых пленок. В рамках модели полей валентных сил получены уравнения движения атомов этих наноструктур и исследован энергетический спектр фононов.

Кристаллическая структура графена схематично показана на Рис. 9. Атомы графена связаны благодаря sp^2 гибридизации и образуют плоскую гексагональную решётку. Элементарная ячейка графена показана в виде заштрихованного ромба и содержит два атома углерода относящихся к разным подрешёткам.

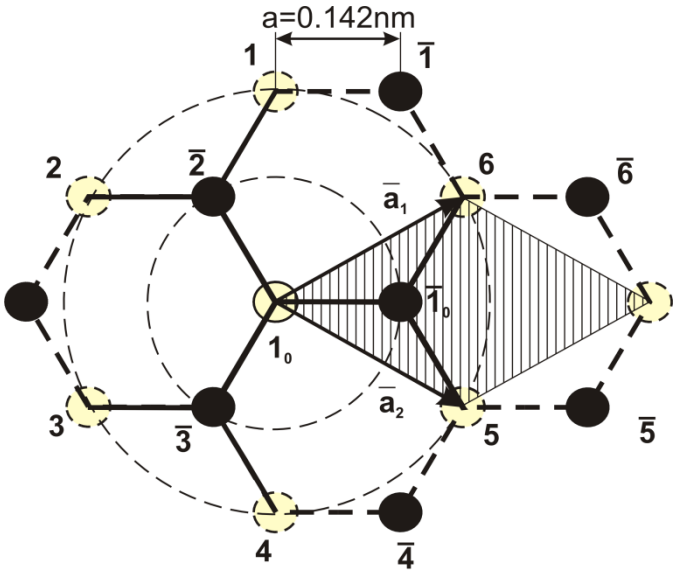


Рис. 9. Кристаллическая решётка графена

Для расчёта фононных дисперсий графена в рамках VFF модели принимались во внимание две сферы взаимодействия между атомами и использовались двух- и трёхчастичные взаимодействия. Общую потенциальную энергию взаимодействия атома с его окружением можно записать как сумму энергий для каждого взаимодействия:

$$V = V^r + V^{2r} + V^{\vartheta} + V^{\vartheta\perp} + V^{2\vartheta\perp} + V^{rr} \qquad (16)$$

где V^r и V^{2r} - это потенциальная энергия “stretching” взаимодействия с атомами из первой и второй атомной сферы соответственно; V^{ϑ} и $V^{\vartheta\perp}$- это потенциальная энергия “bending” взаимодействия с атомами первой атомной сферы при их движение в плоскости графена и перпендикулярно ей; $V^{2\vartheta\perp}$ - это потенциальная энергия “bending” взаимодействия с атомами второй атомной сферы и V^{rr} - это энергия “stretching-stretching” взаимодействия.

Расчёты дисперсионных кривых проводились для основных направлений в первой зоне Бриллюэна. Дисперсии частот фононов в графене показаны на Рис. 10. Справа на этом рисунке показана также плотность фононных состояний. Точками на графике указаны экспериментальные частоты, измеренные в работах [20-25] для графита. Из графика видно, что частоты в графене очень близки к частотам в графите. Это связано с тем, что слои

графита связаны слабыми Ван-дер-Вальсовскими силами и, поэтому, поправки “графит – графен” достаточно малы для направлений в зоне Бриллюэна, соответствующих графену.

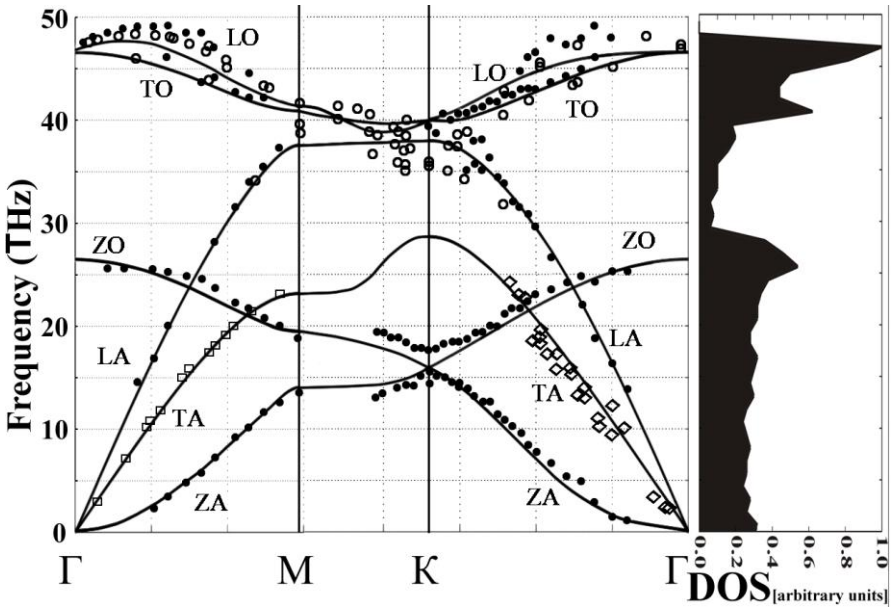


Рис. 10. Фононные дисперсии и DOS в монослое графена, вычисленные с помощью VFF модели.

Фононный спектр графена содержит три акустические ветви и три ветви оптических колебаний. Первые связаны со смещением всей ячейки из положения равновесия, а вторые - отвечают за относительное движение атомов в элементарной ячейке с сохранением центра масс. Акустические ветви в графене обозначают *LA, TA, ZA*, а оптические - *LO*, *TO*, *ZO*, где символы *L* и *T* обозначают продольные и поперечные фононы, распространяющиеся в плоскости кристалла, а *Z* — изгибные моды, когда атомы решётки смещаются в направлении, перпендикулярном плоскости графена.

Установлено, что как в многослойном графене, так и в графеновых нанолентах происходит расщепление энергетических уровней фононов вследствие пространственного конфайнмента фононов. На Рис. 11 показано схематическое изображение двухслойного графена и энергетический спектр фононов в нём. Нижний пучок - акустические моды, верхний – оптические моды. Хотя визуально эти дисперсии похожи на однослойный графен, но число ветвей колебаний в двуслойном графене равно 12 (то есть в два раза больше, чем в однослойном графене) и при малых q заметно небольшое расщепление ZA-фононных ветвей. Причиной этого расщепления является слабое межплоскостное взаимодействие, приводящее к конфайнменту фононов вдоль оси Z.

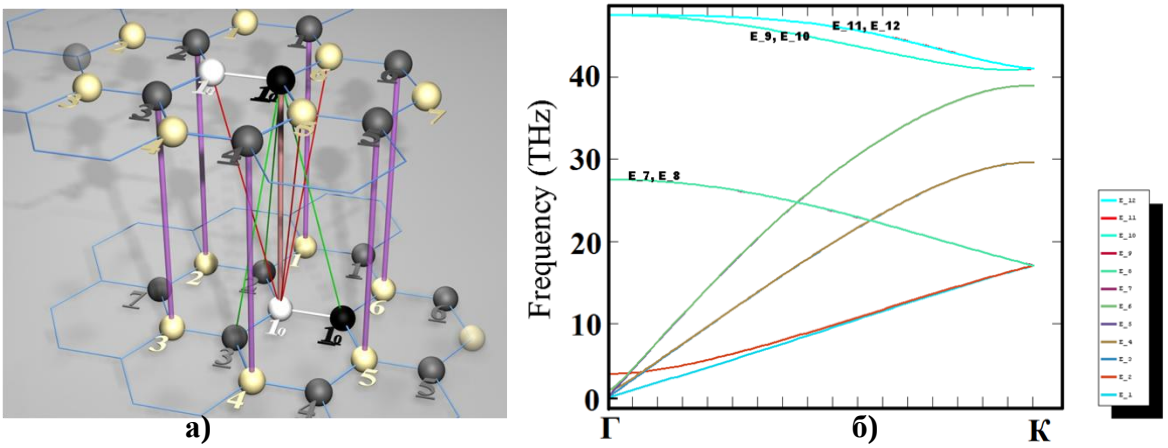


Рис. 11. а) Структура двухслойного графена; б) Дисперсионные кривые для двухслойного графена. Направление Г-К. E_x – обозначение энергетического уровня с номером x = 1-12.

В случае трёхслойного графена дисперсионная картина аналогична, но здесь уже присутствуют 18 энергетических уровней и при малых q расщепление ZA-фононных ветвей, связанное с наличием трёх плоскостей, проявляется более выраженно.

На Рис. 12 показан пример графеновой горизонтальной наноленты (Arm-chair). Она формально имеет бесконечный размер по горизонтали, а по вертикали ограничена некоторым количеством ячеек. На рисунке показаны атомы, которые составляют трансляционный элемент. Это либо красный участок, либо жёлтый. Копируя эти участки вдоль горизонтали можно получить всю структуру.

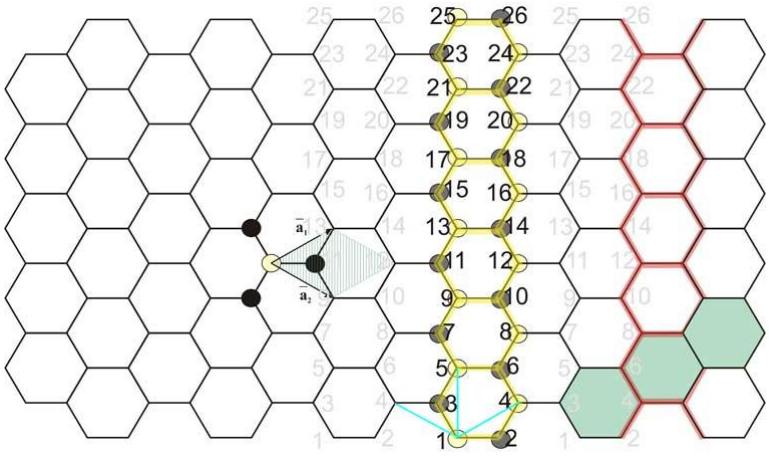


Рис. 12. Горизонтальная графеновая наполента (Arm-chair).

Решая численно систему уравнений движения атомов, принадлежащих трансляционному элементу, были получены фононные дисперсии (см. Рис. 13).

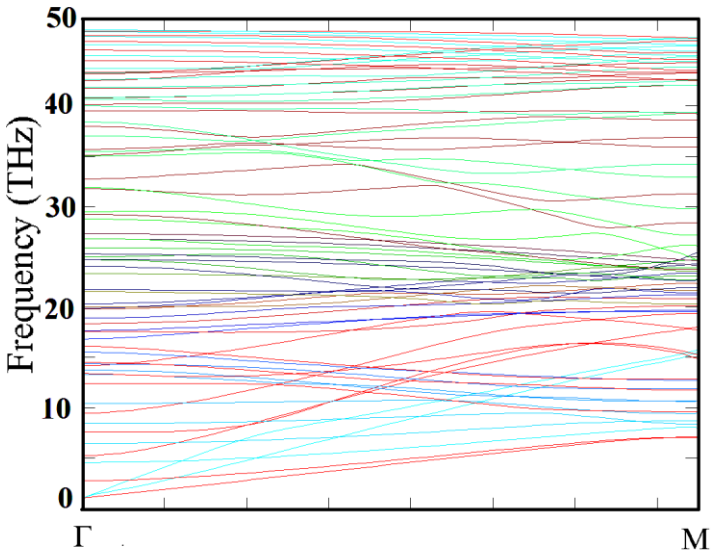


Рис. 13. Дисперсии в горизонтальной (Arm-chair) графеновой наноленте. Направление Г-М.

В нанолентах число ветвей колебаний превышает число ветвей в одно-, двух- и трехслойном графене. Это связано с тем, что нанолента ограничена по ширине. В результате, возникает пространственный конфайнмент фононов, вызывающий расщепление уровней. Пространственное ограничение фононов по ширине наноленты приводит к появлению в ней стоячих волн. Картины расщеплений довольно сильно меняются в зависимости от типа наноленты (Arm-chair или Zig-zag) и вида границ. Аналогичные эффекты проявляются и в карбоновых нанотрубках. Всё это оказывает влияние на кинетические эффекты в графеновых нанолентах.

В этой главе также исследуются зависимости решёточной теплопроводности графеновой плёнки от температуры, ширины и шероховатости её границ. Аналогично случаю плоских полупроводниковых наноструктур, при расчете теплопроводности графена и графеновых лент учитывались два механизма рассеяния фононов: Umklapp – рассеяние и рассеяние фононов на границах слоя/ленты.

На Рис.14 представлена зависимость теплопроводности монослоя графена от ширины листа графена *d*. Параметр поверхностного рассеяния *p* менялся от 0.5 до 0.95. Видна сильная зависимость теплопроводности от ширины листа графена, а также от величины параметра поверхностного рассеяния. Значение *p*=0.95 соответствует почти полному отражению фононов от границ листа графена без рассеяния. При изменении *p* от

0.5 до 0.95 теплопроводность увеличивается в 1.5 раза. При изменении *d* от 5 мкм до 50 мкм теплопроводность также увеличивается примерно в 1.5 раза.

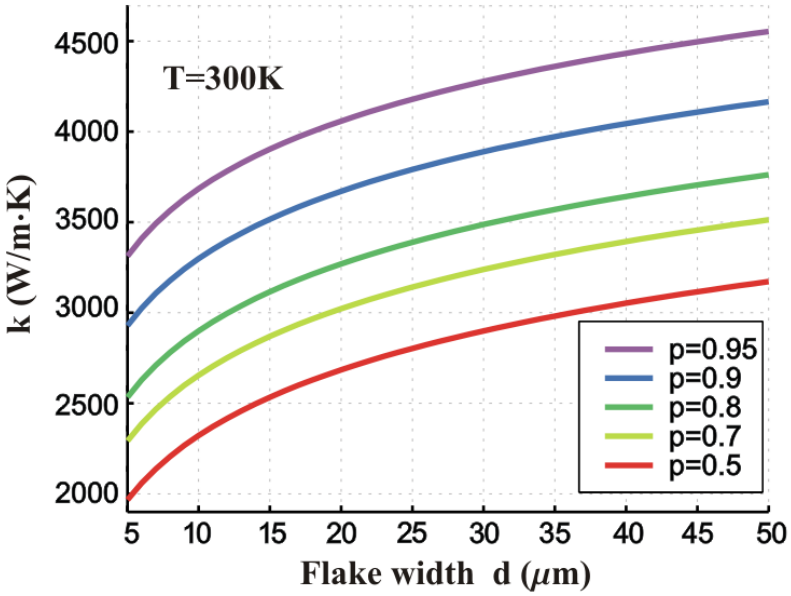


Рис. 14. Зависимость теплопроводности монослоя графена от его ширины *d* для нескольких значений параметра поверхностного рассеяния *p*.

Сильная зависимость теплопроводности плёнки графена от её пространственных размеров и шероховатости краёв может объяснить широкий интервал значений теплопроводности графена, измеренных различными группами экспериментаторов [1,17].

Показано, что графен демонстрирует высокие значения решёточной теплопроводности из-за достаточно слабого (по сравнению с другими полупроводниковыми материалами) рассеяния фононов. В зависимости от ширины пленки, шероховатости ее границ и температуры получены значения теплопроводности в диапазоне от 1500 Вт $м^{-1}$ $К^{-1}$ до 6000 Вт $м^{-1}$ $К^{-1}$.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

В диссертационной работе была развита “Valence force field” модель колебаний кристаллической решётки для алмазоподобных гетероструктур и графеновых слоев. В рамках этой модели были выведены уравнения движения атомов и теоретически изучены фононные состояния

- в плоских трехслойных гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge;
- в квантоворточечных сверхрешётках Si/Ge;
- в графите, графене и графеновых нанолентах.

Были исследованы процессы рассеяния фононов и решёточная теплопроводность в графеновых пленках и плоских гетероструктурах Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge.

Было установлено, что

- в гетероструктурах и сверхрешётках возникает сильное расщепление дисперсионных кривых, вызванное пространственным конфайнментом фононов. В результате этого, число фононных ветвей в наноструктурах больше, чем в объемном случае и зависит от толщины наноструктуры;
- в гетероструктурах и сверхрешётках на базе кремния и германия появляется три вида фононных мод: (1) кремний-подобные моды, колебания которых сосредоточены в кремниевых слоях/квантовых точках; (2) германий-подобные моды, колебания которых сосредоточены в германиевых слоях/германиевой матрице, и общие (гетероструктурные) моды, колебания которых происходят и в кремниевом и в германиевом материале;
- В двухслойном и трехслойном графене появляется расщепление дисперсионных кривых фононов вблизи центра зоны Бриллюэна, которое вызвано пространственным конфайнментом фононов вдоль *Z*-направления. Для всех ветвей колебаний (за исключением *ZA* – ветвей) это расщепление быстро исчезает с ростом q и при $q > 0.4$ nm^{-1} ветви колебаний становятся двукратно вырожденными; ZA – ветвь становится двукратно вырожденной при $q > 7$ nm^{-1};
- В графеновых нанолентах происходит расщепление энергетических уровней фононов вследствие пространственного конфайнмента фононов в направлении перпендикулярном оси наноленты. Картина расщепления уровней зависит как от ширины наноленты, так и от ее типа (“Arm-chair” или Zig-zag”).

- Решёточная теплопроводность в гетероструктурах со слоями нанометровой толщины сильно зависит как от толщины слоев, так и от шероховатости их поверхностей. Эта зависимость объясняется сильным влиянием поверхностного рассеяния фононов на теплопроводность в таких гетероструктурах;
- Температурные зависимости теплопроводности демонстрируют максимум. Этот максимум объясняется противоборством двух эффектов: (I) эффекта увеличения числа фононных мод, участвующих в переносе тепла, с ростом температуры за счет заселения фононных состояний, который увеличивает теплопроводность и (II) эффекта усиления трехфононного Umklapp - рассеяния с ростом температуры, которое уменьшает теплопроводность. В зависимости от толщин и материала слоев гетероструктур, а также от интенсивности поверхностного рассеяния фононов, максимум может быть более или менее выраженным и может достигаться при температурах от ~ 70 К до ~ 200 К.
- Теплопроводность как Si/Ge/Si, так и Ge/Si/Ge наноструктур с нанометровыми толщинами слоев в 3 – 15 раз меньше, чем теплопроводность объемного кремния при T = 300 К. Этот результат хорошо согласуется с предсказаниями более ранних теоретических работ, в которых фононные моды исследовались в рамках менее точных континуальных или “face-centered-cubic cell” моделей.
- Графен демонстрирует высокие значения решёточной теплопроводности из-за достаточно слабого (по сравнению с другими полупроводниковыми материалами) рассеяния фононов. В зависимости от ширины пленки, шероховатости ее границ и температуры получены значения теплопроводности в диапазоне от $1500\,\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$ до $6000\,\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$;
- Сильная зависимость теплопроводности графена от параметров Грюнайзена кристаллической решётки, толщины пленки и шероховатости её границ может объяснить большой разброс значений теплопроводности графена, измеренных в различных экспериментальных работах.

Полученные результаты позволяют сформулировать следующие рекомендации:

- Для количественного описания фононных процессов в наноструктурах необходимо использовать динамические модели колебаний кристаллической решётки;

- Для получения высоких значений теплопроводности в трехслойных Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge гетероструктурах с нанометровыми толщинами слоёв необходимо уменьшить шероховатость поверхностей слоев;
- При сравнении теплопроводности графена, полученной в разных экспериментах, необходимо учитывать ее сильную зависимость не только от температуры, но и от ширины пленки и шероховатости ее границ;
- Необходимо дальнейшее развитие теории поверхностного рассеяния фононов, выходящее за пределы приближения времени релаксации, так как поверхностное рассеяние фононов сильно влияет на решёточную теплопроводность в наноструктурах.

БИБЛИОГРАФИЯ

1. BALANDIN, A. A. Phononics of graphene and related materials. În: *ACS Nano*, 2020, vol. 14, pp. 5170 – 5178.
2. JOYCE, H. J., BOLAND, J. L., DAVIES, C. L. et al. A review of the electrical properties of semiconductor nanowires: insight gained from terahertz conductivity spectroscopy. În: *Semiconductor Science and Technology*, 2016, vol. 31, p. 103003.
3. ZHOU, H., LUO, Z., YANG, X. et al. Toward emerging applications using core–shell nanostructured materials: a review. În: *Journal of Materials Science*, 2022, vol. 57, pp. 10912-10942.
4. FLORY, F., ESCOUBAS, L., BERGINC, G. Optical properties of nanostructured materials: a review. În: J*ournal of Nanophotonics*, 2011, vol. 5, p. 052502.
5. BALANDIN, A. A., NIKA, D. L. Phononics in low-dimensional materials. În: *Materials Today*, 2012, vol. 15, p. 266-275.
6. COCEMASOV, A. I., ISACOVA, C. I., NIKA, D. L. Thermal transport in semiconductor nanostructures, graphene, and related two-dimensional materials. În: *Chinese Physics B*, 2018, vol. 27, p. 056301.
7. LI, D., WU, Y., KIM, PH. et al. Thermal conductivity of individual silicon nanowires. În: *Applied Physics Letters*, 2003, vol. 83, p. 2934.
8. LIU, W., ASHEGHI, M. Thermal conductivity measurements of ultra-thin single crystal silicon layers. În: *Journal of Heat Transfer*, 2006, vol. 128, p. 75-83.
9. NIKA, D. L., ASKEROV, A. S., BALANDIN, A. A. Anomalous size dependence of the thermal conductivity of graphene ribbons, În: *Nano Letters*, 2012, vol. 12, p. 3238-3244.
10. NIKA, D. L. *Phonon engineering in graphene and semiconductor nanostructures*. CEP USM, Chișinău, 2015. 183 p.
11. SURAPRAPAPICH, S., THAINOI, S., KANJANACHUCHAI, S., et al. Quantum dot integration in heterostructure solar cells. În: *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2006, vol. 90, p. 2968.
12. NIKA, D.L., ZINCENCO, N.D., POKATILOV, E.P. Lattice thermal conductivity of ultra-thin freestanding layers: Face-centered cubic cell model versus Continuum Approach. În: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2009, vol. 4, p. 170-173.
13. ZOU, J., BALANDIN, A. Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire. În: *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, p. 2932.

14. NIKA, D.L., ZINCENCO, N.D., POKATILOV, E.P. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures. În: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2009, vol. 4, pp. 180-185.
15. BALANDIN, A., WANG, K.L. Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well. În: *Physical Review B*, 1998, vol. 58, p. 1544-1549.
16. NIKA, D.L., POKATILOV, E.P., ASKEROV, A.S., et al. Phonon thermal conduction in graphene: role of Umklapp and edge roughness scattering. În: *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 79, p. 155413.
17. NIKA, D.L., BALANDIN, A.A. Two-dimensional phonon transport in graphene. În: *J. Phys.: Cond. Matt.*, 2012, vol. 24, pp. 233203.
18. ZIMAN, J. M. *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. New York,Oxford University Press, 2001, 554 p. ISBN 978-0-19-850779-6
19. KLEMENS, P.G. Heat conduction in solids by phonons. În: *Thermochimica Acta*, 1993, vol. 218, pp. 247-255.
20. MAULTZSCH, J., REICH, S., THOMSEN, C., et al. Phonon dispersion in graphite. În: *Phys. Rev. Lett.*, 2004, vol. 92, p. 075501.
21. MOUNET, N., MARZARI, N. First-principles determination of the structural, vibrational and thermodynamic properties of diamond, graphite, and derivatives. În: *Phys. Rev. B*, 2005, vol. 71, p. 205214
22. OSHIMA, C., AIZAWA, T., SOUDA, R. et al. Surface phonon dispersion curves of graphite (0001) over the entire energy region. În: *Solid State Communications*, 1988, vol. 65, 1601.
23. SIEBENTRITT, S., PUES, R., RIEDER, K.-H. et al. Surface phonon dispersion in graphite and in a lanthanum graphite intercalation compound. În: *Physical Review B*, 1997, vol. 55, p. 7927.
24. YANAGISAWA, H., TANAKA, T., ISHIDA, Y. et al. Analysis of phonons in graphene sheets by means of HREELS measurement and ab initio calculation. În: *Surface and Interface Analysis*, 2005, vol. 37, p. 133 – 136.
25. NICKLOW, R., WAKABAYASHI, N., SMITH, H.G. Lattice Dynamics of Pyrolytic Graphite In: *Physical Review B*, 1972, vol. 5, p. 4951.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в научных сборниках из базы данных ISI и SCOPUS

1. NIKA, D.L., **ASKEROV, A.S**., BALANDIN, A.A. Anomalous size dependence of the thermal conductivity of graphene ribbons. In: *Nano Letters*. 2012, vol.12, p.3238−3244. DOI: https://doi.org/10.1021/nl301230g

2. NIKA, D.L., POKATILOV, E.P., **ASKEROV, A.S.**, BALANDIN, A.A. Phonon thermal conductivity in graphene: role of Umklapp and edge roughness scattering. In: *Physical Review B*. 2009, vol. 79, p. 155413-1 – 155413-12. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.155413

Статьи в научных сборниках из Национального Реестра профильных сборников

- categoria B:

3. АСКЕРОВ, А. Фононные спектры в графеновых нанолентах. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria ştiinţe exacte şi economice*. 2018, nr.2(112) pp.53-59 https://exact.studiamsu.md/wp-content/uploads/2018/01/08.-p.53-59.pdf

- categoria C:

4. АСКЕРОВ, А., Теплопроводность плоских полупроводниковых гетероструктур, In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria ştiinţe exacte şi economice*, 2012, nr.7 (57), pp. 40 – 46 https://exact.studiamsu.md/wp-content/uploads/2012/01/06.-p.40-46.pdf

5. ***Артур АСКЕРОВ*** «Фононные свойства квантоточечных сверхрешёток Si/Ge». Studia Universitatis, Section „Physical and Mathematical Sciences", Seria "Stiinte ale naturii", Chisinau, 2009, nr.6(26), p.231-236.

Тезисы в трудах международных научных конференций (Республика Молдова)

6. Askerov, A. S. Valence Force Field model for phonons in graphene and graphene nanoribbons. In: *Abstracts of the 8th Int. Conf. on Materials Science and Condensed Mater Physics, MSCMP 2018, dedicated to the 90 anniversary of the prominent Moldovan physicists Academician Sveatoslav Moskalenko and Academician Vsevolod Moskalenko*, September 25-28, 2018, Chişinău, Moldova, p.88.

Тезисы в трудах национальных научных конференций с международным участием

7. Аскеров, А. Теплопроводность в слоях графена. Conferinţa Ştiinţifică naţională cu participare internaţională In: *Rezumatele ale comunicărilor, Științele exacte, Științele ale naturii, Conferința științifică națională cu participarea internațională „Integrarea prin cercetare și inovare”*, 28-29 septembrie 2016. pp.268-270

8. 1st *International Scientific and Technological Conference "Radio electronics, Informatics, Technology*" *ICRIT 2008*, 15-16 October 2008, Chisinau, Moldova;

9. *5th International Conference on "Microelectronics and Computer Science*, September 19-21, 2007, Chisinau, Moldova;

10. *XIth International Young Scientists' Conference on Applied Physics*, June 15-18, 2011, Kyiv, Ukraine;

11. *XVII Республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика Конденсированного Состояния»,* 16 – 17 Апреля, 2009, Гродно, Беларусь;

12. *8th International Conference on Materials Science and Condensed Mater Physics, MSCMP-2018,* September 25-28, 2018, Chişinău, Moldova;

13. *4th International Conference "Material Science and Condense Matter Physics",* 23-25 September, 2008, Chisinau, Republic of Moldova;

14. *5th International Conference of Young Researchers*, November 9, 2007, Chişinău, Moldova*;*

15. *Conferinţa Ştiinţifică Internaţională dedicată Jubileului de 60 ani ai Universităţii de Stat din Moldova*, 2006, Chişinău, Moldova;

16. *Conferința științifică națională cu participarea internațională „Integrarea prin cercetare și inovare”*, 28-29 septembrie 2016;

17. *Conferinţa Ştiinţifică a Masteranzilor Şi Doctoranzilor, "Cercetare şi Inovare-Perspective de Evoluţie şi Integrare Europeană*, 23 septembrie, 2009. Chisinau, Moldova;

ADNOTARE

Ascherov Artur, teza ***„Teoria molecular-dinamică "Valence Force Field" a heterostructurilor de tipul diamant și a straturilor de grafen: spectrele energetice ale fononilor și conductibilitatea termică"*** **pentru conferirea titlului de doctor în științe fizice, specialitatea 131.04 -** ***Fizica computațională și modelarea proceselor*****, elaborată în Laboratorul de Cercetări Științifice „Fizica și ingineria nanomaterialelor „E. Pocatilov" al Universității de Stat din Moldova, or. Chișinău, R. Moldova, în anul 2023.**

Structura lucrării: Lucrarea este formată din Introducere, trei capitole, Concluzii și Recomandări, Bibliografie din 145 titluri, 134 pagini, 70 figuri, 159 formule. Rezultatele obținute în teză au fost publicate în 20 lucrari științifice și au fost prezentate la 9 conferințe științifice internaționale și naționale.

Cuvinte-cheie: heterostructură planară, superrețea din puncte cuantice, modelul "valence force field", fonon, conductibilitate termică, grafen.

Scopul și obiectivele: dezvoltarea modelului "valence-force-field" al oscilațiilor rețelei cristaline pentru studiul teoretic al stărilor fononice în heterostructurile (HS) Si/Ge/Si și Ge/Si/Ge, în superrețelele formate din punctele cuantice Si/Ge, în straturile și nanopanglicile de grafen, cât și a conductibilității termice de rețea în HS Si/Ge/Si, Ge/Si/Ge și în grafen.

Noutatea științifică și originalitatea: se arată, că conductibilitatea termică de rețea a HS Si/Ge/Si și Ge/Si/Ge cu grosimi nanometrice ale straturilor, este considerabil mai mică decât conductibilitatea termică a siliciului (germaniului) volumetric în diapazonul termic cercetat, situat între 50 K și 400 K; s-a stabilit, că peliculele de grafen posedă valori înalte ale conductibilității termice, cuprinse între 1500 $Wm^{-1}K^{-1}$ și 6000 $Wm^{-1}K^{-1}$ în funcție de temperatură, lățimea peliculei și rugozitatea frontierelor.

Problema științifică soluționată: efectuarea studiului teoretic detaliat al stărilor fononice și a conductibilității termice în HS pe bază de siliciu și germaniu, cât și în grafen.

Valoarea teoretică: dezvoltarea modelului teoretic al stărilor fononice și al conductibilității termice în HS de tip diamant și în grafen.

Valoarea aplicativă a lucrării: rezultatele teoretice obținute vor fi utile experimentatorilor la obținerea HS pe bază de siliciu ori germaniu, a nanostraturilor de grafen, având proprietăți termoconductibile optimale (în dependență de problema soluționată acestea pot fi atât nanostructuri cu conductibilitate termică înaltă, cât și joasă).

АННОТАЦИЯ

Аскеров Артур, диссертация *«Молекулярно-динамическая теория “Valence Force Field” для алмазоподобных гетероструктур и графеновых слоёв: энергетические спектры фононов и теплопроводность»* на соискание ученой степени доктора физических наук по специальности *131.04 «Вычислительная физика и моделирование процессов»,* выполненная в лаборатории «Физика и инженерия наноматериалов имени Е. Покатилова» Государственного Университета Молдовы, г. Кишинев, Р. Молдова, в 2023 году.

Структура работы: Работа состоит из Введения, трех глав, Выводов и рекомендаций, Библиографии из 145 названий, 134 страниц основного текста, 70 рисунков, 159 формул. Полученные результаты опубликованы в 20 научных работах и представлены на 9 международных и национальных конференциях.

Ключевые слова: плоские гетероструктуры, квантоворточечные сверхрешётки, модель valence force field, фононы, теплопроводность, графен.

Цели и задачи: развитие модели колебаний кристаллической решётки “valence-force-field” для теоретического изучения фононных состояний в плоских гетероструктурах (ГС) Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge, квантоворточечных сверхрешётках Si/Ge, графеновых слоях и графеновых нанолентах; а также решёточной теплопроводности в гетероструктурах Si/Ge/Si, Ge/Si/Ge и графене.

Научная новизна и оригинальность: показано, что решёточная теплопроводность гетероструктур Si/Ge/Si и Ge/Si/Ge с нанометровыми толщинами слоев значительно ниже теплопроводности объемного кремния (или германия) в рассмотренном диапазоне температур от 50 К до 400 К; установлено, что графеновые пленки обладают высокими значениями теплопроводности от 1500 $Wm^{-1}K^{-1}$ до 6000 $Wm^{-1}K^{-1}$ в зависимости от температуры, ширины пленки и шероховатости ее границ.

Решенная научная задача: проведено подробное теоретическое изучение фононных состояний и решёточной теплопроводности в гетероструктурах на основе кремния и германия, а также в графене.

Теоретическая значимость: развиты модели фононных состояний и теплопроводности в алмазоподобных гетероструктурах и графене.

Практическая ценность работы: полученные теоретические результаты будут полезны экспериментаторам при получении гетероструктур на основе кремния, германия или графеновых нанослоев с оптимальными теплопроводящими свойствами (в зависимости от задачи это могут быть наноструктуры как с высокой, так и низкой теплопроводностью).

SUMMARY

Ascherov Artur, *"Molecular dynamics theory "Valence Force Field" for diamond-like heterostructures and graphene layers: phonon energy spectra and thermal conductivity",* Ph.D. thesis in physics, speciality 131.04 *Computational physics and modelling of processes,* was elaborated in "E. Pokatilov laboratory of Physics and Engineering of Nanomaterials".

The Thesis consists of an Introduction, 3 Chapters, General conclusions and recommendations, 145 references, 134 pages, 70 figures and 159 equations. The results presented in the Thesis are published in 20 scientific works and presented at 9 international and national conferences.

Keywords: planar heterostructures, quantum dot superlattices, valence force field model, phonons, thermal conductivity, graphene

Goals and objectives: development of the "valence force field" theory of crystal lattice vibrations for the theoretical study of phonon states in planar Si/Ge/Si and Ge/Si/Ge heterostructures, Si/Ge quantum dot superlattices, graphene layers and graphene nanoribbons as well as lattice thermal conductivity in Si/Ge/Si, Ge/Si/Ge heterostructures and graphene.

Scientific novelty and originality: it has been theoretically shown that the lattice thermal conductivity of Si/Ge/Si and Ge/Si/Ge planar heterostructures with nanometer layer thicknesses is significantly lower than the thermal conductivity of bulk silicon (or germanium) in the considered temperature range from 50 K to 400 K; it has been revealed that graphene flakes possess high thermal conductivity values from 1500 $Wm^{-1}K^{-1}$ to 6000 $Wm^{-1}K^{-1}$ in dependence on the temperature, flake width and roughness of their boundaries.

Solved scientific problem: it has been carried out a detailed theoretical study of phonon states and lattice thermal conductivity in silicon- and germanium-based heterostructures, as well as in graphene.

Theoretical importance is related to the development of the theoretical models of phonon states and thermal conductivity in diamond-like heterostructures and graphene.

Practical significance: the obtained theoretical results may be useful for fabrication of silicon- or germanium-based heterostructures or graphene nanolayers with optimal thermal properties (depending on the task, these nanostructures may possess both high or low thermal conductivity).

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

Cu titlu de manuscris

CZU: 539.21

ASCHEROV ARTUR

TEORIA MOLECULAR-DINAMICĂ "VALENCE FORCE FIELD" A HETEROSTRUCTURILOR DE TIPUL DIAMANT ŞI A STRATURILOR DE GRAFEN: SPECTRELE ENERGETICE ALE FONONILOR ŞI CONDUCTIBILITATEA TERMICĂ

131.04 – FIZICA COMPUTAȚIONALĂ ȘI MODELAREA PROCESELOR

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

CHIȘINĂU, 2023

АСКЕРОВ АРТУР

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ “VALENCE FORCE FIELD” ДЛЯ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР И ГРАФЕНОВЫХ СЛОЁВ: ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ФОНОНОВ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

131.04 - ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физических наук

Aprobat spre tipar: 24.04.2024 | Formatul hârtiei 60x84 1/16

Hârtie ofset. Tipar ofset. | Tiraj 12 ex.

Coli de tipar.: 2,1 | Comanda nr. 50/24

Centrul Editorial-Poligrafic al U.S.M.,

str. A. Mateevici 60, MD-2009, Chișinău