

ИНЖЕНЕРИЯ ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ В ПЛОСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ

Денис НИКА, Надежда ЗИНЧЕНКО, Евгений ПОКАТИЛОВ

Лаборатория физики многослойных структур и молекулярного магнетизма

În lucrare se arată, că la amplasarea nanostratului conductibil de căldură în armături confecționate din materiale cu coeficient de rigiditate mai mic, este posibil de a realiza efectul paradoxal de micșorare a valorii fluxului termic care circulă prin întreaga heterostructură în comparație cu fluxul termic prin stratul singular. În calitate de exemplu este cercetată heterostructura $\text{P}/\text{Si}/\text{P}$. Dependențele dispersive pentru fononii acustici sunt obținute în cadrul modelului molecular-dinamic Face-centered cubic cell. Se arată că în heterostructura 3-stratificată există trei tipuri de mode de oscilație: (1) „comune” (distribuite după toată grosimea heterostructurii), (2) „interioare” și (3) „exterioare”, concentrate în stratul interior și în armăturile heterostructurii, corespunzător. Micșorarea fluxului termic poate fi obținută la amplificarea difuziei fononilor modelor „comune” pe suprafețele exterioare ale heterostructurii.

In the paper is shown that one can obtain the decreasing of thermal flux in heterostructure in comparison with thermal flux in the slab covering the heat conducting nanoslab with claddings with smaller elasticity constants. As an example, the Si-based heterostructure was chosen. The dispersion relations for acoustic phonons were obtained in the framework of molecular-dynamic Face-centered cubic cell model. It is shown, that there are three types of phonon modes in three-layered heterostructure: (1) “common” modes (distributed over whole heterostructure thickness), (2) “internal” modes and (3) “external” modes, which are concentrated mainly in the core and cladding layers correspondingly. One can reach the thermal flux decreasing, enhancing the phonon external boundary scattering of “common” modes.

Введение

С уменьшением размеров современных приборов и с увеличением количества рассеиваемого ими тепла проблема отвода теплоты и управления тепловыми свойствами становится особенно важной для дальнейшего прогресса электронной промышленности. Уменьшение теплопроводности, снижающее отвод тепла от современных микро- и наночипов, является нежелательным для низкоразмерных электронных приборов, но оно благоприятно для термоэлектрических устройств, где требуются материалы с высокой электропроводностью и низкой теплопроводностью. Построение последовательной теории теплового транспорта в наноструктурах является исключительно важным для предсказания и описания новых физических эффектов.

Эффективность термоэлектрических устройств определяется коэффициентом «figure of merit» $ZT = S^2 \sigma T / (\kappa_{ph} + \kappa_e)$, где S , σ , T , κ_{ph} и κ_e представляют собой коэффициент Зеебека, электропроводность, абсолютную температуру, фононную теплопроводность и электронную теплопроводность соответственно. Низкая теплопроводность, т.е. малый тепловой поток в наноструктурах по сравнению с объемными материалами делают их перспективными для термоэлектрического охлаждения и термоэлектрических приборов [1-2]. Было показано, что наноструктурированные термоэлектрические материалы демонстрируют высокое значение $ZT \sim 1,0$ благодаря уменьшению теплового потока [3].

Теоретически было показано, что соответствующим выбором материальных параметров и толщин внешних слоев можно увеличить или уменьшить групповую скорость во внутреннем слое гетероструктур по сравнению с однородным слоем или нитью без оболочки [4,5]. Изменение свойств наноструктур путем модификации их спектра акустических фононов носит название «фононной инженерии» [2-3]. В случае, когда толщина проводящего канала фиксированна (например, для «сохранения» электронных свойств [6-7]), надлежащий выбор материала и толщин обкладочных слоев может быть единственным альтернативным путем для управления тепловыми потоками.

В данной работе показано, что можно значительно уменьшить тепловой поток через кремниевый слой путем наложения на него обкладок из P (вещества с меньшими упругими постоянными, чем в Si) и изменения параметров поверхностного рассеяния фононов.

Теоретическая модель

Тепловой поток на единицу градиента температуры, полученный с учетом двумерной плотности состояний, имеет вид [8]:

$$W_{ph} = \frac{1}{4\pi k_B T^2} \sum_{s,\alpha} \int_0^{q_{\max}} \{ \hbar \omega_s^\alpha(q) v_s^\alpha(q) \}^2 \tau_{s,tot}^\alpha(\omega_s^\alpha) \frac{\text{Exp}(\hbar \omega_s^\alpha(q) / k_B T)}{(\text{Exp}(\hbar \omega_s^\alpha(q) / k_B T) - 1)^2} q \} dq,$$

где суммирование ведётся по всем акустическим ветвям s всех поляризаций α ; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; q – фононное волновое число. Энергии $\hbar \omega_s^\alpha(q)$ и групповые

скорости $v_s^\alpha(q)$ акустических фононов, используемые в расчёте теплового потока, были нами получены в рамках динамической FCC-модели численным решением системы уравнений (1) из [8].

Полное время релаксации фонона вычислялось с помощью формулы

$$1/\tau_{s,tot}^\alpha(\omega_s^\alpha) = 1/\tau_{s,U}^\alpha(\omega_s^\alpha) + 1/\tau_{s,PD}^\alpha(\omega_s^\alpha) + 1/\tau_{s,Disl.}^\alpha(\omega_s^\alpha) + 1/\tau_{s,B}^\alpha(\omega_s^\alpha),$$

где

$$1/\tau_{s,U}^\alpha = (\gamma_\alpha^2 k_B T \omega_s^\alpha) / (\bar{\rho}_s V_0 \omega_{\alpha,max}^s (v_s^\alpha)^2), \quad 1/\tau_{s,PD}^\alpha = (S_0 \Gamma q (\omega_s^\alpha)^2) / (4v_s^\alpha),$$

$$1/\tau_{s,Disl.}^\alpha = \eta N_D (V_0)^{4/3} \omega_s^3 / (v_s^\alpha)^2, \quad 1/\tau_{s,B}^\alpha = v_s^\alpha / d \times (1-p) / (1+p) \quad (1)$$

это скорости рассеяния фонона в Umklapp процессах, на точечных дефектах, границах и дислокациях соответственно.

В (1) γ_α – параметр Грюнайзена, Γ – мера интенсивности рассеяния на точечных дефектах, N_D – плотность дислокационных линий, η – весовой множитель, учитывающий взаимную ориентацию направлений градиента температуры и дислокационных линий, V_0 – объем, приходящийся на один атом, S_0 – средняя площадь на один атом двумерной пленки, $\omega_{\alpha,max}^s$ – максимальная частота (s, α, q) фононной ветви, $\bar{\rho}_s(q) = \int_{-d/2}^{d/2} |\bar{u}_s^\alpha(z, q)|^2 \rho(z) dz$ учитывает неоднородность структуры по толщине вдоль оси Z , p – параметр, характеризующий силу поверхностного рассеяния.

Результаты и их обсуждение

В работе рассмотрен однородный кремниевый слой толщиной 4 нм, а также гетероструктура PI/Si/PI с толщиной канала, равной 4 нм, и различными толщинами внешних слоев. Пластик представляет собой модельный материал, упругие константы которого соответствуют значениям в органическом низкоскоростном материале, и обладает кристаллической структурой с постоянной решетки, как и в Si. Зависимость фононных энергий от q для PI/Si/PI гетероструктуры с размерами 1 нм/4 нм/1 нм и однородного Si слоя толщиной 4 нм показана на рис. 1(а,б) для SA-поляризованных фононов. Пластиковые обкладки уменьшают наклон низкоэнергетических дисперсионных кривых по сравнению с кремниевым слоем и практически не влияют на высокоэнергетические Si-подобные моды.

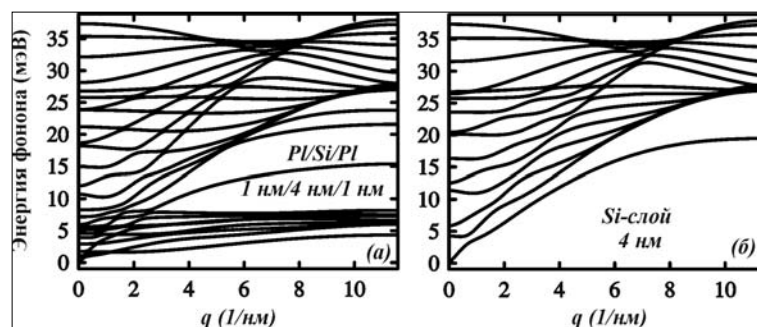


Рис. 1. Энергии акустических фононов SA-поляризации: (а) в трехслойной гетероструктуре PI/Si/PI с размерами 1 нм/4 нм/1 нм и (б) в однородном слое Si толщиной $d = 4$ нм.

Из рис. 1 следует, что фононные моды в PI/Si/PI гетероструктуре можно разделить на три различных типа: (1) «внешние» PI-подобные моды с энергиями $\hbar\omega < 8$ мэВ и со смещениями, сконцентрированными в PI слоях, (2) «смешанные» («общие») моды с $\hbar\omega < 25$ мэВ, смещения которых распределены по всей толщине гетероструктуры, и (3) «внутренние» Si-подобные моды с энергиями $\hbar\omega \geq 25$ мэВ, смещения которых сконцентрированы, в основном, в кремнии. Амплитуды смещений Si-подобных мод быстро уменьшаются в PI и наоборот, PI-подобные моды быстро затухают в Si. На рис. 2 (а,б,в) представлено распределение амплитуды вектора смещения U по толщине гетероструктуры для (а) «общей» моды ($s=10, q=0.92$ нм⁻¹), (б) Si-подобной моды ($s=25, q=1.04$ нм⁻¹) и (в) PI-подобной моды ($s=1, q=0.58$ нм⁻¹).

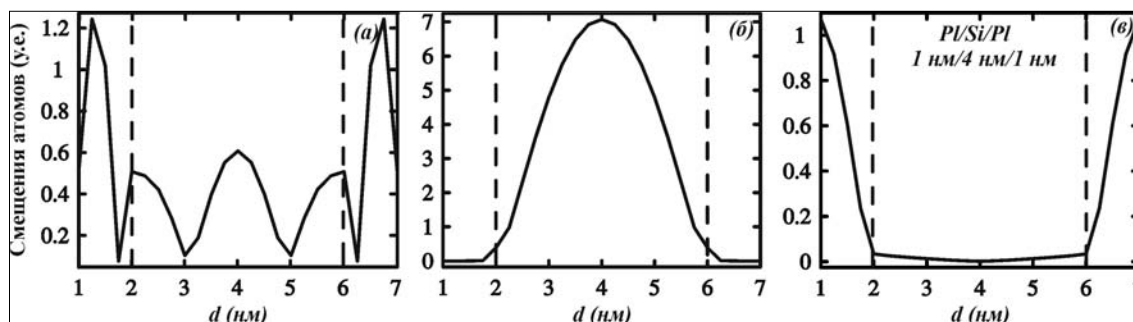


Рис. 2. Амплитуды векторов смещения в гетероструктуре PI/Si/PI (1 нм/4 нм/1 нм) для: (а) «смешанной» моды, (б) Si-подобной моды, (в) PI-подобной моды.

В данной работе мы учли эти особенности фоновых мод при рассмотрении их рассеяния на поверхностях слоев гетероструктуры. «Общие» моды рассеиваются на границах внутреннего Si слоя гетероструктуры и на внешних границах гетероструктуры; Si-подобные моды рассеиваются только на границах внутреннего Si слоя, а PI-подобные моды рассеиваются на границах PI слоев.

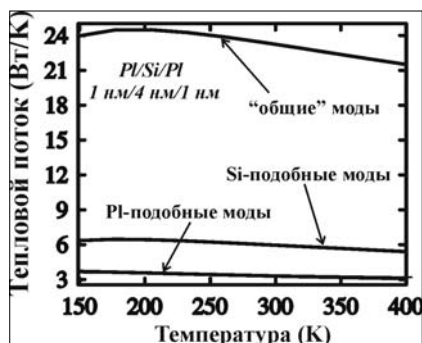


Рис. 3. Тепловой поток, переносимый различными типами фоновых мод, как функция температуры в гетероструктуре PI/Si/PI (1 нм/4 нм/1 нм).

Для Si слоя толщиной $d = 4$ нм, равной толщине кремниевого слоя гетероструктуры (штрихпунктирная линия).

На рис. 3 показаны температурные зависимости тепловых потоков, переносимых «общими», Si-подобными и PI-подобными фоновыми модами. Важно отметить, что основной вклад в суммарный тепловой поток вносят «общие» гетероструктурные моды. Ослабление участия этих мод в процессе теплопроводности, которое легко может быть достигнуто уменьшением качества внешних поверхностей гетероструктуры и усилением поверхностного рассеяния этих фоновых мод, приводит к заметному уменьшению теплового потока через гетероструктуры, что может быть полезно для термоэлектрических устройств на базе гетероструктур.

Для иллюстрации такой возможности на рис. 4 (а) показана зависимость теплового потока от температуры в гетероструктуре PI/Si/PI с размерами 1 нм/4 нм/1 нм для различных параметров p_{out} на внешних поверхностях гетероструктуры и фиксированного параметра $p_{in} = 0,7$ на поверхности внутреннего Si слоя. Для сравнения построена также зависимость теплового потока от температуры для Si слоя толщиной $d = 4$ нм, равной толщине кремниевого слоя гетероструктуры (штрихпунктирная линия).

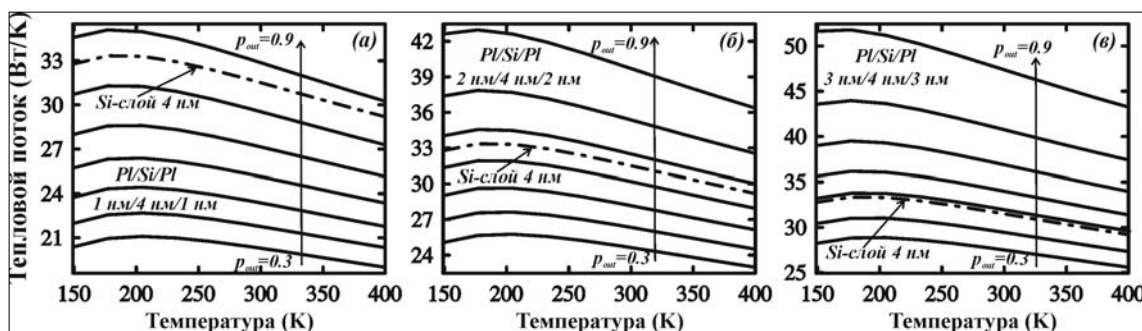


Рис. 4. Зависимость теплопотока от абсолютной температуры в гетероструктуре PI/Si/PI с размерами 1 нм/4 нм/1 нм (а), 2 нм/4 нм/2 нм (б) и 3 нм/4 нм/3 нм (в) и однородном Si слое (4 нм) для различных значений параметра рассеяния фононов на внешних поверхностях.

Для значений параметра $p_{out} = 0,3 - 0,8$ тепловой поток в гетероструктуре меньше, чем в Si слое, хотя полная толщина гетероструктуры в 1,5 раза больше, чем толщина слоя. Это падение теплового потока объясняется подавлением вклада «общих» и PI-подобных фоновых мод в переносе тепла за счет их рассеяния на внешних обкладках гетероструктуры, а также меньшими групповыми скоростями фононов общих мод в такой гетероструктуре по сравнению с однородным слоем. С ростом параметра p_{out} рассеяние фоновых мод на внешних границах гетероструктуры уменьшается, тепловой поток увеличивается и при $p_{out} = 0,9$ он становится больше, чем поток в Si слое.

В гетероструктуре $\text{P}/\text{Si}/\text{P}$ с более толстыми обкладками (2 нм/4 нм/2 нм и 3 нм/4 нм/3 нм) тепловой поток становится меньше, чем поток в Si слое (см. рис. 4(б,в)) уже для меньших значений $p_{out} = 0,4$ и $p_{out} = 0,6$ соответственно. Это объясняется сильным увеличением толщины гетероструктуры по сравнению с Si каналом. В этом случае только значительное поверхностное рассеяние на границах гетероструктуры (малые значения p_{out}) выключает «общие» и P -подобные моды из процессов переноса тепла.

Заклучение

Исследовано влияние толщины внешних слоев, а также параметров поверхностного рассеяния фононов, на тепловой поток в $\text{P}/\text{Si}/\text{P}$ гетероструктуре и возможности его уменьшения. Показано, что основную роль в теплопотоке играют «общие» гетероструктурные моды. Увеличивая рассеяние этих мод на внешних поверхностях гетероструктуры, можно существенно уменьшить тепловой поток. Этот эффект вместе с эффектом уменьшения групповых скоростей фононных мод в гетероструктуре с «акустически мягкими» обкладками приводит к уменьшению теплопотока в гетероструктуре по сравнению со слоем без обкладок.

Указанная возможность управления тепловыми потоками в гетероструктуре может способствовать улучшению теплового менеджмента, в частности – улучшению термоэлектрических свойств наноразмерных приборов.

Литература:

1. Cahill D., Ford W., Goodson K., Mahan G., Majumdar A., Maris H., Merlin R., Phillpot S.. Nanoscale thermal transport // J. Appl. Phys. - 2003. - Vol. 93. - P. 793.
2. Balandin A. Nanophononics: Phonon engineering in nanostructures and nanodevices // J. Nanosci. Nanotechnol. - 2005. - Vol. 5. - P. 1015-1022.
3. Dresselhaus M.S., Chen G., Tang M.Y., Yang R., Lee H., Wang D., Ren Z., Fleureau J.P. and Gogna P. New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials // Adv.Mater. - 2007. - Vol. 19. - P. 1043-1055.
4. Balandin A.A., Pokatilov E.P. and Nika D.L. Phonon engineering in hetero- and nanostructures // J.Nanoelectron. Optoelectron. - 2007. - Vol. 2. - P. 140-170.
5. Pokatilov E.P., Nika D.L. and Balandin A.A. A phonon depletion effect in ultrathin heterostructure with acoustically mismatched layers // Appl. Phys. Lett. - 2004. - Vol. 85. - P. 825-827; Acoustic-phonon propagation in rectangular semiconductor nanowires with elastically dissimilar barriers // Phys. Rev. B. - 2005. - Vol. 72. - P. 113311-113314; Phonon spectrum and group velocities in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ and related heterostructures // Superlatt. Microstruct. - 2003. - Vol. 33. - P. 155–171.
6. Pokatilov E.P., Nika D.L. and Balandin A.A. Electron mobility enhancement in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ heterostructures with InGaN nanogrooves // Appl. Phys. Lett. - 2006. - Vol. 89. - P. 112110-112112; The built-in field effect on the electron mobility in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ quantum wells // Appl. Phys. Lett. - 2006. - Vol. 89. - P. 113508–113510.
7. Pokatilov E.P., Nika D.L., Askerov A.S., Zencenco N.D. and Balandin A.A. The size-quantized oscillations of the optical-phonon-limited electron mobility in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ nanoscale heterostructures // J.Physics C. - 2007. - Vol. 92. - P. 012022-012025.
8. Nika D.L., Zencenco N.D., Pokatilov E.P. and Balandin A.A. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures // J.Nanoelectron. Optoelectron. - 2009. - to be published.

Работа выполнена при финансовой поддержке Академии наук Молдовы (гранты 08.819.05.05F и 06.408.036F).

Prezentat la 13.03.2009