

Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники»

Объект авторского права

УДК 539.216.2:620.3

ХОМЕЦ
Александр Леонидович

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И РЕШЁТОЧНАЯ
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ СВОБОДНЫХ СЛОИСТЫХ ПЛЁНОК Si/Ge
НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ**

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы
(материалы для электроники и фотоники)

Минск 2026

Научная работа выполнена в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Научный руководитель

Мигас Дмитрий Борисович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой микро- и наноэлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Официальные оппоненты:

Кушнир Василий Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры теоретической физики и астрофизики Белорусского государственного университета

Прищепя Сергей Леонидович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры защиты информации учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Оппонирующая организация

Государственное научно-практическое объединение «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»

Защита состоится «23» апреля 2026 г. в 14⁰⁰ на заседании совета по защите диссертаций Д 02.15.07 при учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, корп. 1, ауд. 232, e-mail: dissovet@bsuir.by, тел. +375-17-293-89-89.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Автореферат разослан «19» марта 2026 г.

Ученый секретарь совета по защите диссертаций
доктор физико-математических наук, профессор



С.К. Лазарук

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия активизировался поиск дешёвых, нетоксичных и доступных термоэлектрических материалов. Эффективность термоэлектрического преобразования оценивается с помощью безразмерного коэффициента термоэлектрической добротности (ZT), который прямо пропорционален термоЭДС и электропроводности, и обратно пропорционален теплопроводности материала. Эффективный термоэлектрический материал должен одновременно обладать высокой термоЭДС и электропроводностью, а также низкой теплопроводностью. Считается, что значение коэффициента ZT должно составлять 3–4, чтобы термоэлектрические устройства могли конкурировать по эффективности с традиционными холодильными установками и электрическими генераторами.

В настоящее время наиболее эффективными термоэлектрическими материалами в широком диапазоне температур являются халькогениды на основе Te , Bi , Pb , Sb , Sn , Se , имеющие значения коэффициента ZT от 1,0 до 2,7. В качестве альтернативы халькогенидам может выступать кремний (Si), неупорядоченные твёрдые растворы $SiGe$ и силициды, поскольку они хорошо совместимы с отработанной кремниевой технологией. Кремний обладает значительным потенциалом в качестве термоэлектрического материала с точки зрения значения «фактора мощности» ($\sim 10\text{--}40 \text{ мкВт/см}\cdot\text{K}^2$) при высоких уровнях легирования, что обусловлено сильным вырождением зоны проводимости, однако имеет очень высокую решёточную теплопроводность ($\sim 140 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$ для чистого Si) из-за чего значение коэффициента $ZT \approx 0,01$ при 300 К. Использование наноструктур, где эффект квантового ограничения способствует повышению термоЭДС, а рассеяние фононов на поверхности, интерфейсах и дефектах нанометровых размеров может оказывать большее влияние на решёточную теплопроводность, чем на подвижность носителей заряда, в целом способствует увеличению коэффициента ZT , значения которого для наноструктур $SiGe$ достигают 0,1–0,6 при 300 К и 1,3–1,8 при высоких температурах.

Таким образом, поиск наноструктур на основе Si и Ge для термоэлектрических применений является актуальным. Учитывая, что в наноструктурах может существенно изменяться тепловой транспорт, для более детальной оценки перспектив применения слоистых плёнок Si/Ge с толщиной до 100 нм необходимо комплексное исследование влияния морфологии на их решёточную теплопроводность.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами (проектами), темами

Тема диссертационной работы соответствует приоритетным направлениям фундаментальных и прикладных научных исследований, а также приоритетным направлениям научной, научно-технической и

инновационной деятельности Республики Беларусь на 2021–2025 гг., утвержденным Указом Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г. № 156.

Диссертационная работа выполнялась в рамках научной программы «Перспективные материалы на основе кремния для преобразования энергии» в ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии» подпрограммы «Наноструктурные материалы, нанотехнологии, нанотехника («Наноструктура»)» на 2021–2025 годы (№ гос. рег. 20211111).

Целью работы являлось установление закономерностей влияния морфологии (ориентации поверхности и интерфейсов, периода сверхрешётки, количества периодов и толщины диффузионно-перемешанных интерфейсов) на поперечную и продольную решёточную теплопроводность (001)-, (110)- и (111)-ориентированных слоистых плёнок Si/Ge с толщиной до 100 нм с помощью метода неравновесной молекулярной динамики при температуре 300 К. **Объект исследования** – свободные слоистые плёнки Si/Ge с ориентациями (001), (110) и (111). **Предмет исследования** – решёточная теплопроводность и процессы фононного теплопереноса в слоистых плёнках Si/Ge при 300 К.

Для достижения поставленной цели решались следующие научные задачи:

1. Исследовать поперечную решёточную теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами, а также выявить особенности, связанные с рассеянием фононов, которые обуславливают изменение теплопроводности.

2. Исследовать механизмы рассеяния фононов, которые обуславливают продольную решёточную теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами, и выявить роль морфологии в изменении теплопроводности.

3. Исследовать поперечную и продольную решёточную теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами и выявить основные механизмы рассеяния фононов, которые влияют на теплопроводность.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы заключается в установлении закономерностей влияния морфологии на решёточную теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с ориентациями (001), (110) и (111) и толщиной до 100 нм. При этом впервые:

1. Установлены слоистые плёнки Si/Ge с резкими интерфейсами и различными ориентациями, обладающие наименьшей и наибольшей поперечной и продольной решёточной теплопроводностью.

2. Определено, что слоистые плёнки Si/Ge с резкими интерфейсами характеризуются более существенным влиянием ориентации поверхности и

интерфейсов на продольную решёточную теплопроводность, чем на поперечную теплопроводность.

3. Показано, что в слоистых плёнках Si/Ge с периодом сверхрешётки ~2 нм существует эффективная толщина диффузионно-перемешанных интерфейсов, при которой поперечная решёточная теплопроводность слоистых структур ниже, чем у плёнок со структурой неупорядоченного твёрдого раствора $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ (т. е. ниже предела сплава).

4. Обнаружено, что слоистым плёнкам Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами свойственна аномальная зависимость, выражающаяся в снижении продольной решёточной теплопроводности при увеличении толщины плёнки.

5. Выявлено, что слоистым плёнкам Si/Si_{0,5}Ge_{0,5} с периодом сверхрешётки ~2 нм свойственна более низкая поперечная и продольная решёточная теплопроводность по сравнению со слоистыми плёнками Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами.

Положения, выносимые на защиту

1. Для (001)-, (110)- и (111)-ориентированных слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами, периодом сверхрешётки в диапазоне 1,1–1,9 нм и при количестве периодов более 40 наименьшее значение поперечной теплопроводности (5,43 Вт/(м·К)) соответствует ориентации (111), а при количестве периодов менее 40 оно присуще (001) ориентации (0,36–4,71 Вт/(м·К)), что обусловлено различием средней длины свободного пробега фононов.

2. При продольном теплопереносе в структурах с резкими интерфейсами имеет место анизотропия продольной теплопроводности, которая проявляется как в объёмных сверхрешётках Si/Ge с ориентацией (110) (разница значений теплопроводности 8,0 Вт/(м·К) для (110)/[001] и (110)/[$\bar{1}10$]), так и в слоистых плёнках Si/Ge с ориентациями (001) (разница значений 10,4 Вт/(м·К) для (001)/[$\bar{1}10$] и (001)/[110]) и (110) (разница значений 13,6 Вт/(м·К) для (110)/[001] и (110)/[$\bar{1}10$]) при уменьшении количества периодов с 48 до 1, что обусловлено различным влиянием ориентации поверхности и интерфейсов на рассеяние акустических и низкочастотных оптических фононов.

3. В (001)-, (110)- и (111)-ориентированных слоистых плёнках Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами увеличение толщины плёнки с 2 до 20 нм и более сопровождается аномальным снижением продольной решёточной теплопроводности (в 1,4–2,3 раза в зависимости от ориентации и кристаллографического направления), которое свойственно почти всем кристаллографическим направлениям (за исключением (001)/[$\bar{1}10$]), что связано с конкуренцией механизмов рассеяния фононов на поверхности и фонон-фононного рассеяния.

Личный вклад соискателя учёной степени в результаты диссертации

Основные результаты исследований в диссертации получены соискателем самостоятельно. Вклад научного руководителя д.ф.-м.н. Мигаса Д. Б. заключался в постановке цели и задач исследования и обсуждении полученных результатов. Соавтор работ к.ф.-м.н. Сафронов И. В. оказывал помощь при разработке методики моделирования, а также участвовал в обсуждении полученных результатов. Соавтор работ к.ф.-м.н. Филонов А. Б. участвовал в обсуждении полученных результатов. Соавтор Холяво И. И. изучал сопутствующие вопросы, не связанные с темой диссертации. Результаты, полученные соавторами публикаций, в диссертацию не вошли.

Апробация диссертации и информация об использовании её результатов

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: «Материалы и структуры современной электроники» (Минск, Беларусь, 14–16 октября 2020 г.); 57-й, 58-й и 59-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР (Минск, Беларусь, 19–23 апреля 2021 г., 18–22 апреля 2022 г., 17–21 апреля 2023 г.); Мокеровские чтения (Москва, РФ, 22–23 мая 2024 г.); «Компьютерное проектирование в электронике» (Минск, Беларусь, 28 ноября 2024 г.).

Результаты диссертации применяются в учебном процессе на кафедре микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники БГУИР в курсе лекций «Современные проблемы физики конденсированного состояния» (имеется 1 акт о практическом использовании результатов).

Опубликованность результатов диссертации

Основные результаты диссертации опубликованы в 10 научных работах, в числе которых 4 статьи в рецензируемых научных журналах, соответствующих пункту 19 Положения о присуждении учёных степеней и присвоении учёных званий (общим объёмом 5,1 авторского листа), 3 статьи в сборниках материалов научных конференции, 3 тезиса докладов.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из перечня сокращений и условных обозначений, введения, общей характеристики работы, пяти глав, заключения, списка использованных источников и приложения. Полный объём диссертации составляет 104 страницы. Диссертация содержит 34 рисунка на 32 страницах, 3 таблицы на 3 страницах и 3 приложения на 4 страницах. Список использованных источников содержит 136 наименований, включая собственные публикации соискателя учёной степени, и занимает 11 страниц.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Первая глава посвящена аналитическому обзору литературы на тему теплопереноса в тонких плёнках и сверхрешётках на основе кремния и германия. Кратко описываются особенности теплопереноса в твёрдых телах. Приведены подходы улучшения термоэлектрической эффективности материалов. Представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований влияния морфологии на теплопроводность тонких плёнок Si и сверхрешёток Si/Ge. Отмечены некоторые нерешённые вопросы, на основе которых была сформулирована цель исследования.

Во **второй главе** приведены теоретические методы, используемые для оптимизации моделируемых структур, моделирования решёточной теплопроводности, расчёта фононных характеристик, а также описаны объекты исследования. На рисунке 1 приведена упрощённая схема различных этапов моделирования.

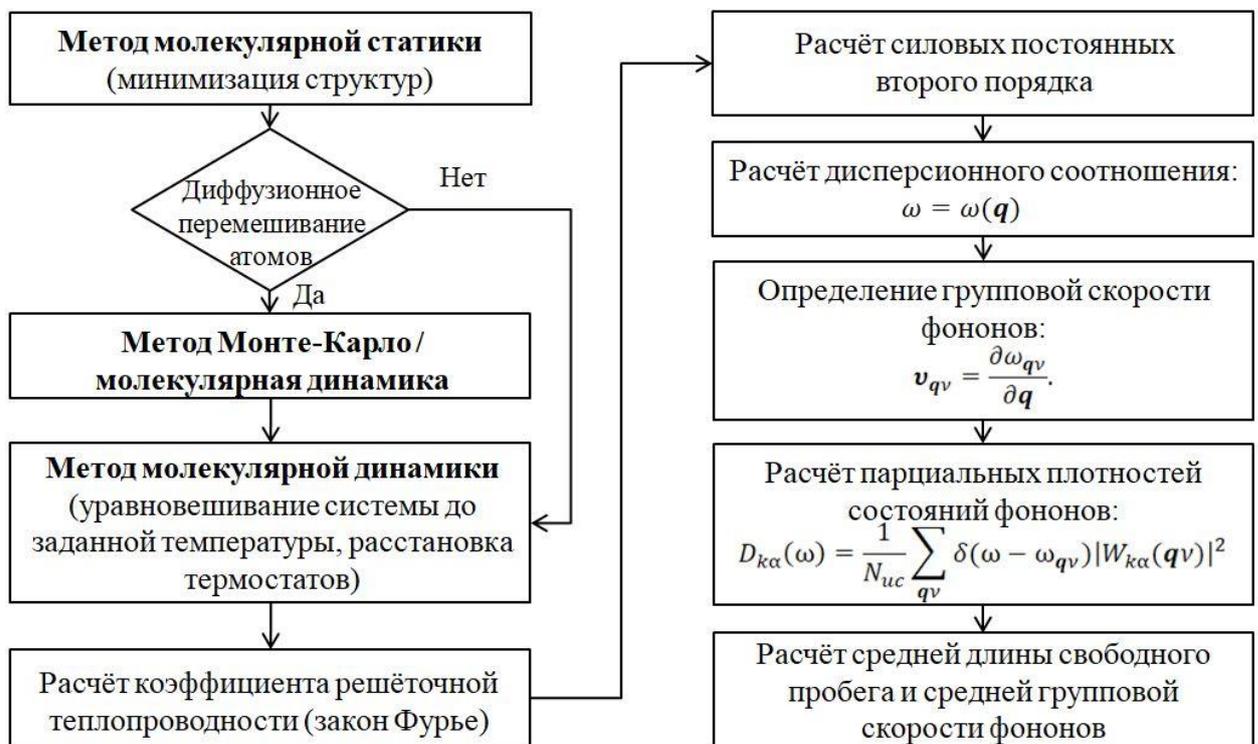


Рисунок 1 – Упрощенная схема моделирования решёточной теплопроводности и расчёта фононных характеристик

где ω – частота фононов; \mathbf{q} – волновой вектор; ν – индекс фононной зоны; $\mathbf{v}_{q\nu}$ – групповая скорость фононов в фононной моде $\mathbf{q}\nu$; $D(\omega)$ – парциальные плотности состояний фононов; k – индекс атомов, которые находятся в своих равновесных положениях; α – индекс декартовых координат; N_{uc} – количество элементарных ячеек; $\delta(\omega)$ – дельта функция; $W_{k\alpha}(\mathbf{q}\nu)$ – собственные векторы фононов в фононной моде $\mathbf{q}\nu$.

Минимизация потенциальной энергии всех моделируемых структур проводилась с помощью метода молекулярной статистики. Для генерации

диффузионно-перемешанных интерфейсов и слоёв $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (где $x = 0,1, 0,3$ и $0,5$) применялся гибридный метод Монте-Карло/молекулярная динамика. Моделирование решёточной теплопроводности (далее теплопроводность) осуществлялось с помощью метода неравновесной молекулярной динамики. Перечисленные методы реализованы в программном пакете LAMMPS. Коэффициент решёточной теплопроводности определялся из закона Фурье по следующей формуле:

$$\kappa_l = - \frac{E}{2S_{\text{п}} \cdot t_{\text{м}} \cdot (dT/dx)}, \quad (1)$$

где E – перенесённая тепловая энергия; $t_{\text{м}}$ – время моделирования; $S_{\text{п}}$ – площадь поперечного сечения; dT/dx – температурный градиент вдоль направления распространения теплового потока; 2 – коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях.

Расчёт фоновых характеристик проводился в гармоническом приближении с использованием подхода сверхъячеек в программе Phonopy. Оценка средней групповой скорости и средней длины свободного пробега фононов (далее СДСП) проводилась с помощью приближения частотно-независимых свойств фононов.

В работе рассматриваются (001)-, (110)- и (111)-ориентированные свободные слоистые плёнки Si/Ge без учёта возможных упругих напряжений от подложки, поэтому имеет место одновременная релаксация слоёв Si и Ge, что эффективно снижает упругие напряжения, увеличивает критическую толщину, при которой формирование 3D островков становится термодинамически выгодно, и в конечном итоге позволяет исследовать слоистые плёнки с достаточно большими значениями периода сверхрешётки. Диапазоны структурных параметров (периода сверхрешётки (d), количества периодов (N), толщины плёнок (L) и толщины диффузионно-перемешанных интерфейсов (δ) обобщены в таблице 1. Также рассматривались объёмные сверхрешётки Si/Ge (т.е. слоистые структуры без поверхностей).

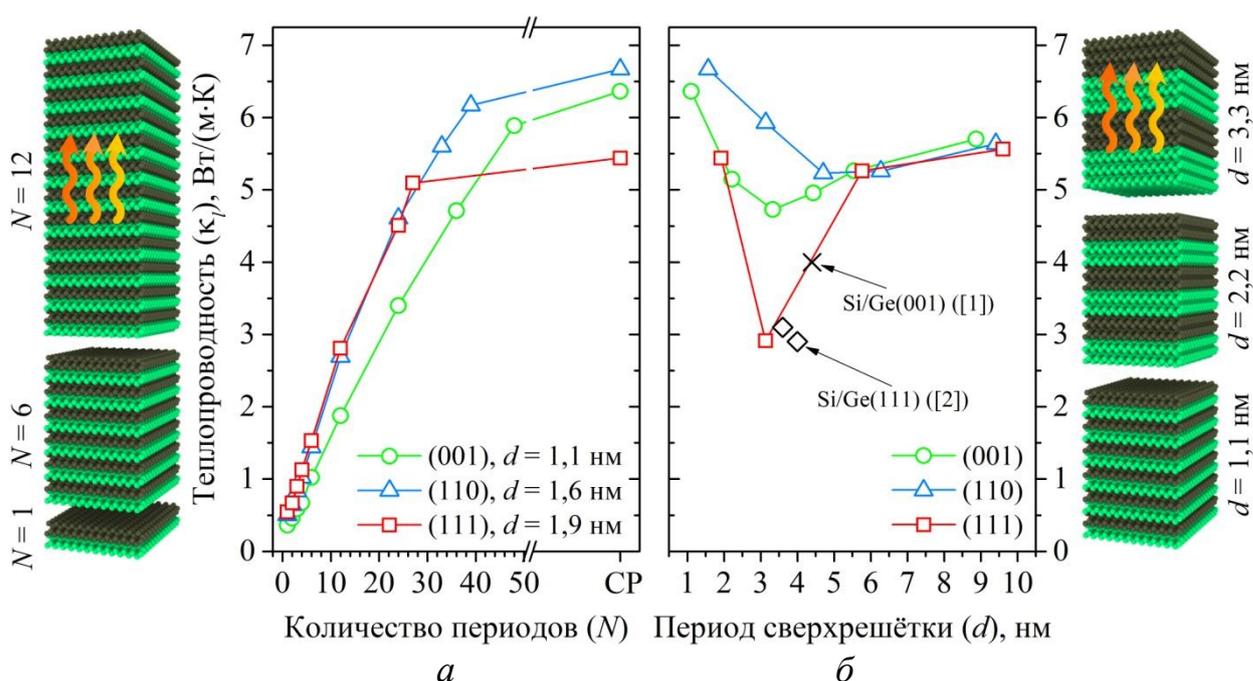
Таблица 1 – Структурные параметры слоистых плёнок Si/Ge с различными ориентациями

Ориентация	d , нм	N	L , нм	δ , МС
(001)	1,1–8,9	1–48	1,1–53,2	2, 4, 6
(110)	1,6–9,4	1–48	1,6–75,3	2, 4
(111)	1,9–9,6	1–27	1,9–51,9	2, 4

В **третьей главе** представлены результаты моделирования поперечной теплопроводности для слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами в зависимости от d , N и L при 300 К.

Показано, что слоистые плёнки Si/Ge (двухслойные и многослойные) всех рассматриваемых ориентаций с L от 1,1–1,9 до 5,8–6,8 нм характеризуются более низкой поперечной теплопроводностью по сравнению с плёнками Ge (в 1,8–2,5 раза) и Si (в 2,6–3,7 раза) с эквивалентной толщиной за счёт рассеяния фононов на интерфейсах.

Установлено, что для слоистых плёнок Si/Ge всех рассматриваемых ориентаций с увеличением количества периодов имеет место существенное повышение поперечной теплопроводности с выходом на насыщение с 0,36 до 6,36 Вт/(м·К) для ориентации (001), с 0,50 до 6,67 Вт/(м·К) для ориентации (110) и с 0,55 до 5,44 Вт/(м·К) для ориентации (111), что указывает на переход от баллистического к диффузионному теплопереносу (рисунок 2, а).



a – поперечная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge; b – поперечная теплопроводность объёмных сверхрешёток Si/Ge; [1] – Thermal conductivity of symmetrically strained Si/Ge superlattices / T. Borca-Tasciuc [et al.] // Superlattices and Microstruct. – 2000. – Vol. 28, № 3. – P. 199–206; [2] – Thermal conductivity in strain symmetrized Si/Ge superlattices on Si(111) / S. Chakraborty [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2003. – Vol. 83, № 20. – P. 4184–4186

Рисунок 2 – Зависимости поперечной теплопроводности (001)-, (110)- и (111)-ориентированных слоистых плёнок и объёмных сверхрешёток Si/Ge от количества периодов и периода сверхрешётки при 300 К

При малом количестве периодов поперечная теплопроводность линейно увеличивается, что свидетельствует о преимущественно баллистическом теплопереносе, поскольку СДСП фононов ограничена толщиной плёнки. Отклонение от линейного увеличения поперечной теплопроводности означает, что фононы начинают распространяться более диффузионно внутри структуры вследствие повышения роли фонон-фононного рассеяния. Увеличение теплопроводности при этом

сопровождается пересечением зависимостей для слоистых плёнок с ориентациями (001) и (111) при N более 40 (рисунок 2, а). Наименьшая поперечная теплопроводность (0,36–4,71 Вт/(м·К)) при N от 1 до 40 характерна для плёнок с ориентацией (001), тогда как при N более 40 она свойственна плёнкам с ориентацией (111) (5,43 Вт/(м·К)). Было предложено, что это обусловлено различием скорости насыщения «протяжённых» фононов (т. е. фононов, способных пересекать интерфейсы и распространяться в соседних слоях), которая (скорость насыщения) зависит от СДСП фононов. Рассчитанная СДСП фононов с помощью приближения частотно-независимых свойств фононов для объёмных сверхрешёток (далее СР) составила 279,2 нм для ориентации (001) и 243,2 нм для ориентации (111). Таким образом, состояние насыщения, когда «протяжённые» фононы не способны пересекать интерфейсы и испытывают фонон-фононное рассеяние достигается раньше в слоистых плёнках с ориентацией (111).

Результаты моделирования также показали, что для объёмных сверхрешёток Si/Ge имеет место немонотонная (с наличием минимума) зависимость поперечной теплопроводности от периода сверхрешётки для всех рассматриваемых ориентаций (рисунок 2, б). Характерный минимум поперечной теплопроводности достигается при $d = 3,3$ нм (4,72 Вт/(м·К)) для ориентации (001), при $d = 4,7$ нм (5,23 Вт/(м·К)) для ориентации (110) и при $d = 3,1$ нм (2,91 Вт/(м·К)) для ориентации (111), что на 21,6–46,4 % ниже поперечной теплопроводности слоистых плёнок с $d = 1,1–1,9$ нм. Такая зависимость от d обусловлена переходом от некогерентного к когерентному теплопереносу. Физическая причина повышения поперечной теплопроводности при уменьшении d ниже критического значения интерпретируется как увеличение средней групповой скорости фононов из-за уменьшения схлопывания зоны Бриллюэна, что приводит к меньшему расщеплению акустических и оптических ветвей на дисперсионных кривых. Резкое снижение поперечной теплопроводности для сверхрешёток Si/Ge с ориентацией (111) при $d = 3,1$ нм объясняется плоскими продольной (LA) и одной поперечной (TA_1) акустическими ветвями на дисперсионных кривых, что является причиной более низкой средней групповой скорости фононов по сравнению с ориентациями (001) и (110).

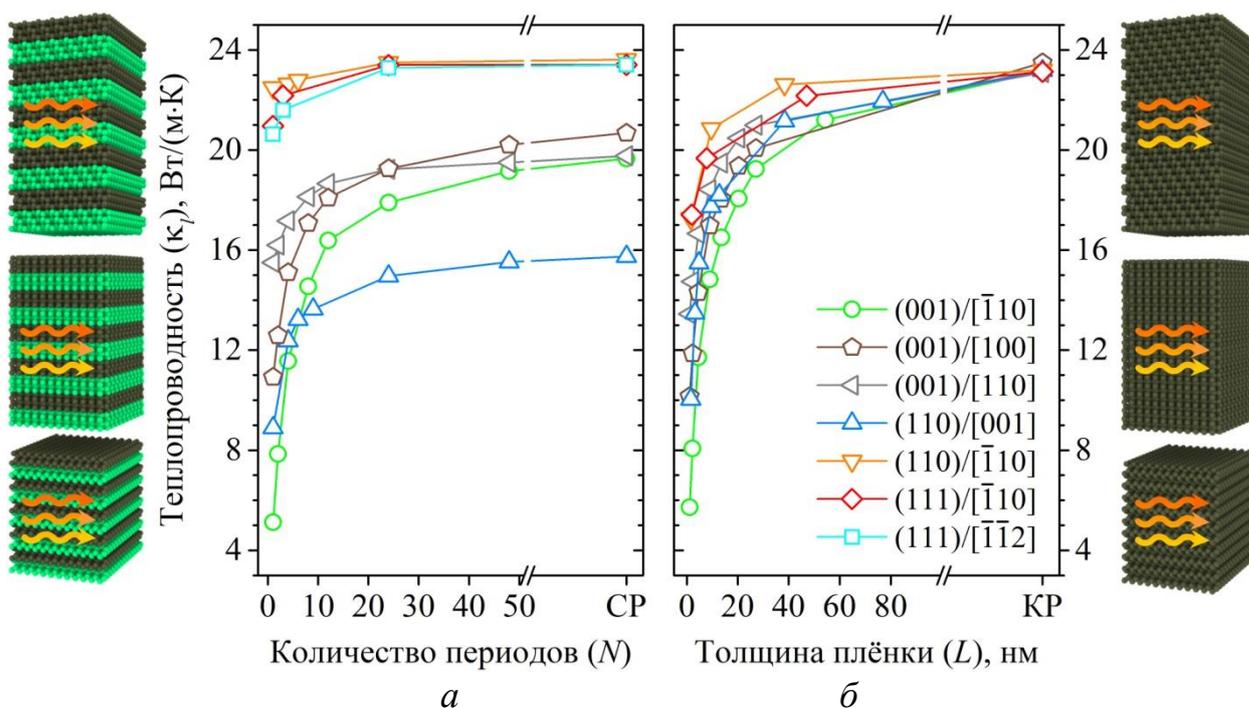
Выявлено удовлетворительное согласие между результатами, полученными в диссертации, и результатами других экспериментальных исследований поперечной теплопроводности сверхрешёток Si/Ge с ориентациями (001) и (111), которые нанесены на рисунок 2, б.

Чтобы определить, как влияют обе терминирующие поверхности гетероструктуры из одного материала на поперечную теплопроводность, проведено дополнительное моделирование для слоистых плёнок Si/Ge с добавленными слоями Si или Ge на поверхности. Установлено, что путём добавления Si-терминирующей поверхности поперечная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge может быть дополнительно снижена на ~7 % (с 3,39 до 3,16 Вт/(м·К)) для ориентации (001), на ~13 % (с 4,6 до 4,0 Вт/(м·К)) для

ориентации (110) и на ~4 % (с 4,5 до 4,3 Вт/(м·К)) для ориентации (111). Это объясняется более диффузионным теплопереносом в структурах с Si-терминирующими поверхностями.

В **четвертой главе** представлены результаты моделирования продольной теплопроводности слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами в зависимости от d , N и L при 300 К.

Установлена существенная роль ориентации поверхности в рассеянии фононов, которая заключается в различии скорости насыщения продольной теплопроводности в зависимости от N (или L). Наибольшее повышение продольной теплопроводности в 1,8–3,8 раза для слоистых плёнок Si/Ge при увеличении N от 1 до 48 и более свойственно направлениям (001)/[$\bar{1}10$] (с 5,12 до 19,7 Вт/(м·К)), (110)/[001] (с 8,9 до 15,7 Вт/(м·К)) и (001)/[100] (с 10,9 до 20,7 Вт/(м·К)) (рисунок 3, *а*). Аналогичные выводы справедливы для плёнок Ge, однако имеет место более существенное повышение продольной теплопроводности для данных направлений в 2,3–4,0 раза (рисунок 3, *б*).



а – продольная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge; *б* – продольная теплопроводность плёнок Ge

Рисунок 3 – Зависимости продольной теплопроводности вдоль различных кристаллографических направлений в слоистых плёнках Si/Ge от количества периодов и плёнках Ge от их толщины при 300 К

Разная скорость насыщения продольной теплопроводности слоистых плёнок определяет её анизотропию, которая уменьшается с ростом N , что обусловлено перераспределением основного механизма фононного рассеяния из-за снижения роли поверхности и повышения роли интерфейсов в рассеянии фононов. Для слоистых плёнок Si/Ge разница в значениях продольной теплопроводности достигает 10,4 Вт/(м·К) для направлений

$(001)/[\bar{1}10]$ и $(001)/[110]$ и $13,6 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ для направлений $(110)/[001]$ и $(110)/[\bar{1}10]$ при $N = 1$. С увеличением N с 1 до 48 и более анизотропия существенно снижается и сохраняется только в слоистых плёнках с ориентацией (110) . В случае объёмной сверхрешётки Si/Ge ($N = \text{CP}$) разница в значениях продольной теплопроводности составляет $8 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ для направлений $(110)/[001]$ и $(110)/[\bar{1}10]$ (см. рисунок 3, *a*).

Выявлены особенности дисперсионных кривых и парциальных плотностей состояний фононов, которые обуславливают анизотропию продольной теплопроводности слоистых плёнок Si/Ge с ориентациями (001) и (110) при малой толщине плёнок. Направлениям $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$ свойственна локализация акустических и низкочастотных оптических фононов на поверхности, а также акустико-оптическое сцепление (acoustic-optical coupling), что вызывает дополнительное рассеяние акустических фононов, а также является причиной снижения их групповой скорости.

В случае слоистых плёнок Si/Ge, которым свойственна наименьшая продольная теплопроводность, имеет место пересечение зависимостей при N более четырёх для направлений $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$ (рисунок 3, *a*). По аналогии с поперечным теплопереносом это объясняется различием скорости насыщения «протяжённых» фононов, которая зависит от их групповой скорости и скорости рассеяния (или их производной величины – СДСП фононов). Рассчитанная с помощью приближения частотно-независимых свойств фононов средняя групповая скорость для направлений $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$ соответственно составила $113,3$ и $196,3 \text{ м}/\text{с}$ для слоистых плёнок при $N = 1$, а также $417,3$ и $332,4 \text{ м}/\text{с}$ для объёмных сверхрешёток. Более низкая средняя групповая скорость фононов означает, что фононы медленнее распространяются в материале, что приводит к низкой теплопроводности.

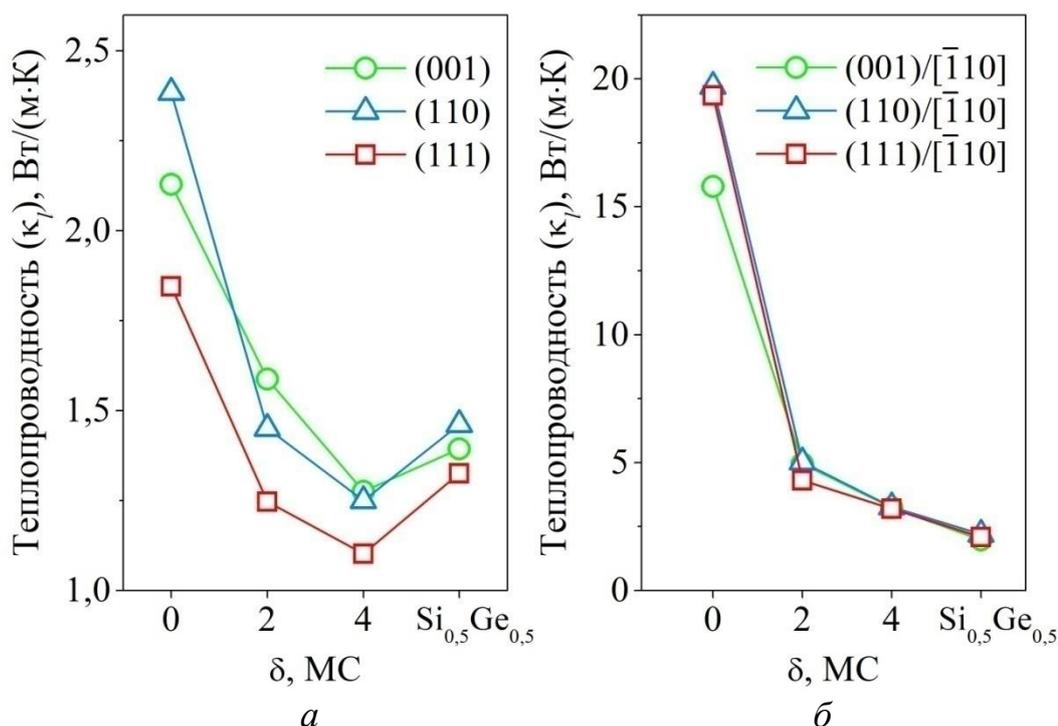
Преимущество слоистых плёнок Si/Ge над плёнками Ge с точки зрения более низкой продольной теплопроводности имеет место для направлений $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$ при любом N . Для данных направлений увеличение N повышает разницу в значениях продольной теплопроводности между плёнками Ge и слоистыми плёнками Si/Ge с $10,5$ до $15,1 \%$ для направления $(001)/[\bar{1}10]$, и с $11,3$ до $32,3 \%$ для направления $(110)/[001]$, что свидетельствует об увеличении интенсивности рассеяния фононов на интерфейсах.

Чтобы проверить, как влияют обе терминирующие поверхности гетероструктуры из одного материала на продольную теплопроводность, было проведено дополнительное моделирование слоистых плёнок Si/Ge с добавленными слоями Si или Ge на поверхности. Для ориентации (001) не обнаружено практически никаких существенных изменений в зависимости теплопроводности от количества периодов. Для ориентации (110) и (111) было обнаружено дополнительное понижение (или повышение) теплопроводности на $3\text{--}4 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ при толщинах плёнок менее 10 нм , если добавленные поверхности образованы соответственно атомами Ge (или Si).

Добавление Si- и Ge-терминирующих поверхностей приводит к снижению степени поверхностной локализации фононов, что отражается на эффективности фононного рассеяния, а также увеличивает долю более (или менее) теплопроводящей фазы в плёнках с толщиной менее 10 нм, что приводит к снижению (или увеличению) средней групповой скорости фононов при продольном теплопереносе.

В пятой главе представлены результаты моделирования поперечной и продольной теплопроводности слоистых плёнок Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами. Плёнки всех рассматриваемых ориентаций имели $d \approx 2$ нм. Дополнительно исследовались плёнки со структурой неупорядоченного твёрдого раствора $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, а также слоистые плёнки $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, $\text{Ge}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ (где $x = 0,1$ и $0,3$).

Было установлено, что при поперечном теплопереносе существует эффективная толщина диффузионно-перемешанных интерфейсов ($\delta = 4$ нм), при которой поперечная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge всех рассматриваемых ориентаций (1,10–1,28 Вт/(м·К)) ниже на 7,9–17,3 % (или на 0,11–0,23 Вт/(м·К)), чем у плёнок $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ (рисунок 4, а).



a – поперечная теплопроводность; *б* – продольная теплопроводность
Рисунок 4 – Зависимости поперечной и продольной теплопроводности (001)-, (110)- и (111)-ориентированных плёнок Si/Ge от толщины диффузионно-перемешанных интерфейсов при 300 К

Чтобы подтвердить этот вывод для слоистых плёнок с ориентацией (001) было проведено дополнительное моделирование при $\delta = 6$ нм, тогда как для слоистых плёнок с ориентациями (110) и (111) при $d \approx 2$ нм увеличение δ более 4 нм превращало слоистую плёнку в плёнку $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$.

Было выявлено отсутствие дальнейшего снижения поперечной теплопроводности при $\delta = 6$ МС (теплопроводность была сопоставима с теплопроводностью при $\delta = 4$ МС и составила 1,28 Вт/(м·К)), тогда как продольная теплопроводность монотонно снижалась до 2,59 Вт/(м·К). При поперечном теплоперенос слоистым структурам Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами свойственна более низкая средняя групповая скоростью фононов по сравнению с неупорядоченными твёрдыми растворами $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, что является причиной низкой теплопроводности.

Результаты моделирования поперечной теплопроводности в зависимости от толщины плёнок представлены на рисунке 5. Выявлено, что для всех рассматриваемых ориентаций при L более 5 нм наиболее эффективное подавление поперечной теплопроводности слоистых плёнок Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами по сравнению с плёнками $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ имеет место при $\delta = 4$ МС.

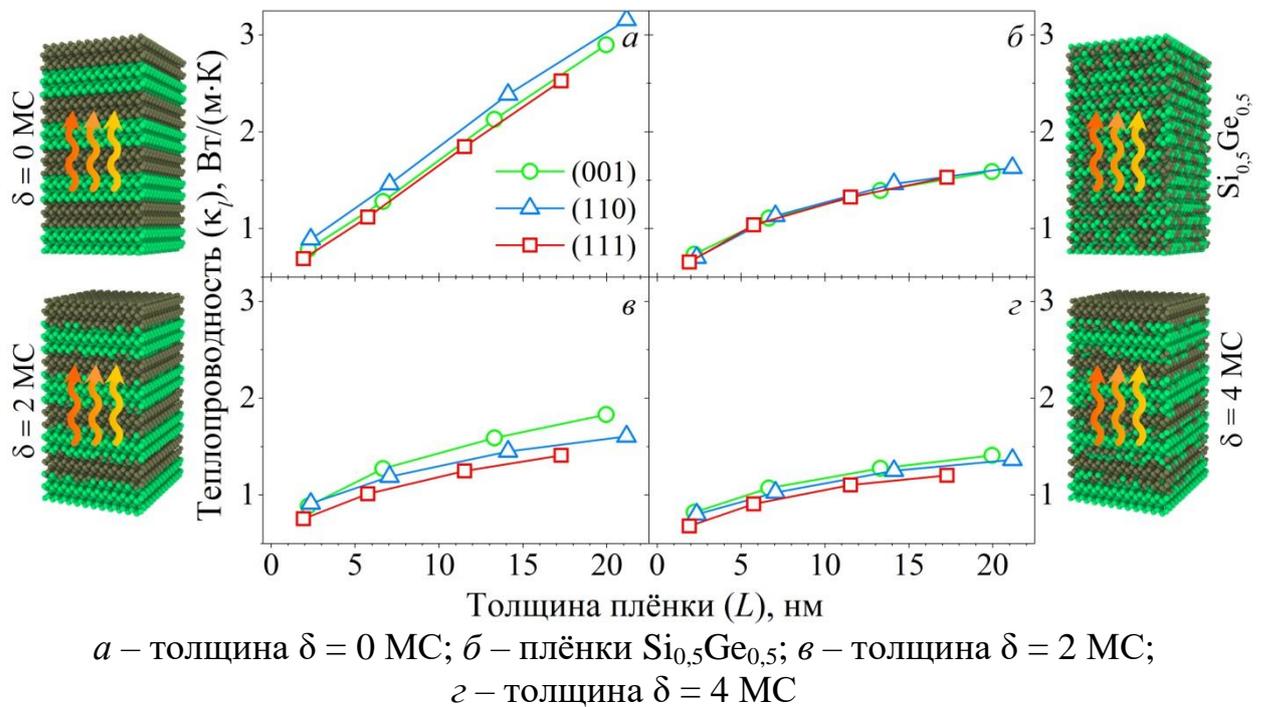


Рисунок 5 – Зависимости поперечной теплопроводности от толщины (001)-, (110)- и (111)-ориентированных слоистых плёнок Si/Ge с разной толщиной диффузионно-перемешанных интерфейсов при 300 К

Поперечная теплопроводность слоистых плёнок с $\delta = 4$ МС при $L \approx 20$ нм менее 1,5 Вт/(м·К), что ниже значений для неупорядоченных твёрдых растворов $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, а также близко к значениям, характерным для аморфных материалов ($\sim 1,0$ Вт/(м·К)). Линейное повышение теплопроводности с увеличением L от ~ 2 нм до ~ 20 нм при $\delta = 0$ МС обусловлено наличием фононов, распространяющихся баллистически, тогда как отклонение от линейной зависимости связано с наличием фононов, распространяющихся диффузионно (значительно увеличивается при $\delta > 0$ МС).

Результаты моделирования продольной теплопроводности в зависимости от толщины плёнок представлены на рисунке 6. Наиболее эффективное подавление продольной теплопроводности характерно для плёнок $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ по сравнению со слоистыми плёнками Si/Ge с любой толщиной δ , при этом разница в значениях продольной теплопроводности имеет тенденцию к снижению при увеличении L , что ранее не наблюдалось. Продольная теплопроводность плёнок $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ существенно ниже (на ~60–65 %), чем слоистых плёнок Si/Ge почти для всех рассматриваемых направлений (за исключением $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$). Наименьшая продольная теплопроводность (1,65 Вт/(м·К)) свойственна плёнкам $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ вдоль направления $(110)/[001]$ при $L \approx 2$ нм, что на 51 % ниже наименьшей продольной теплопроводности (3,37 Вт/(м·К)) слоистых плёнок Si/Ge с $\delta = 4$ МС при $L \approx 2$ нм вдоль направления $(001)/[\bar{1}10]$.

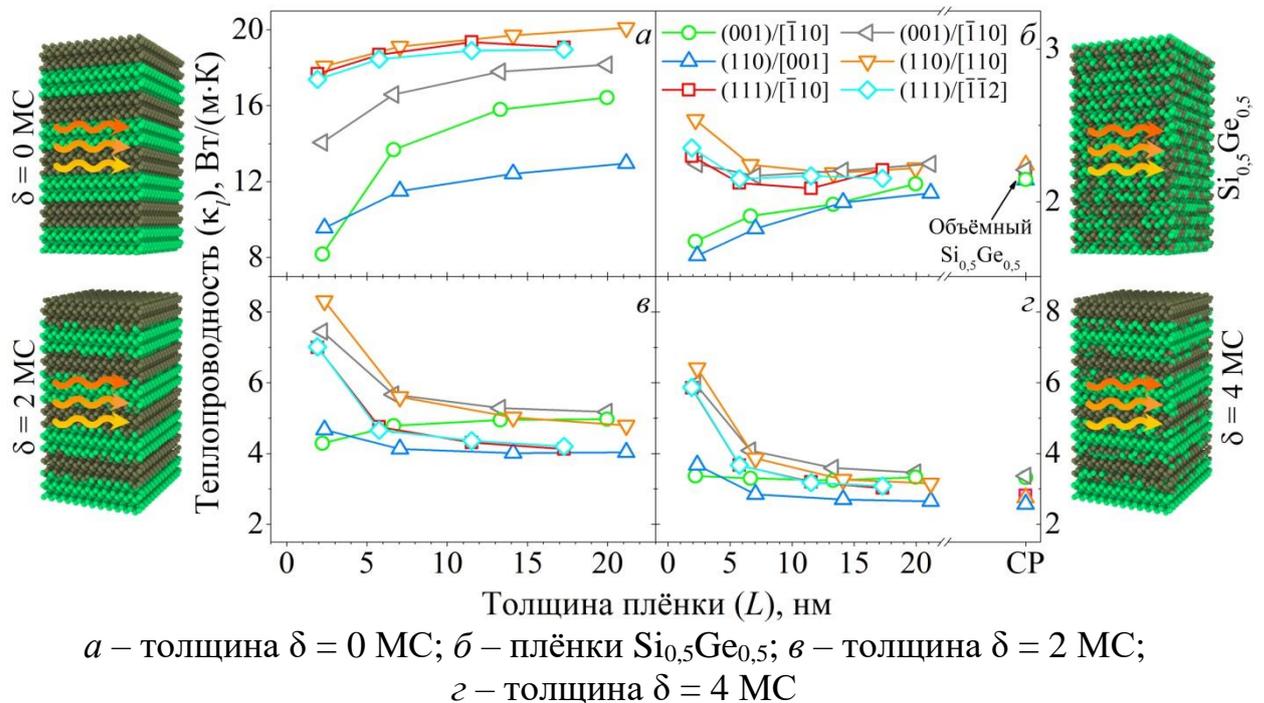
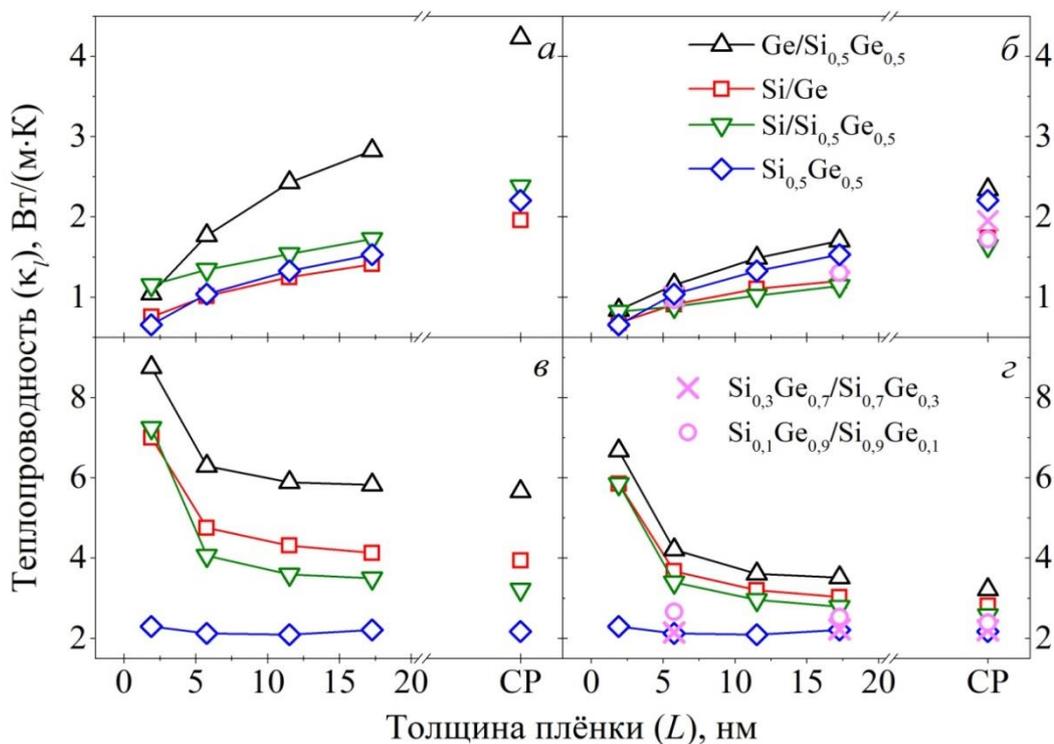


Рисунок 6 – Зависимости продольной теплопроводности от толщины (001)-, (110)- и (111)-ориентированных плёнок с разной толщиной δ при 300 К

Также было обнаружено, что для слоистых плёнок Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами имеет место аномальная зависимость, заключающаяся в снижении продольной теплопроводности при увеличении толщины плёнок с ~2 до ~20 нм и более (рисунок 6, c и d), что ранее не наблюдалось. Наибольшее снижение продольной теплопроводности (в 1,4–2,3 раза в зависимости от ориентации и кристаллографического направления) с 6,4–3,7 до 3,4–2,6 Вт/(м·К) имеет место при $\delta = 4$ МС, когда L увеличивается с ~2 до ~20 нм. Данный эффект связан с конкуренцией механизмов фонон-фононного рассеяния (обусловлен фононным истощением из-за уменьшения толщины плёнки) и рассеяния фононов на поверхности

(обусловлен локализацией акустических и низкочастотных оптических фононов на поверхности, что вызывает дополнительное рассеяние акустических фононов).

Дополнительно было проведено моделирование поперечной и продольной теплопроводности для слоистых плёнок $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, $\text{Ge}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ (где $x = 0,1$ и $0,3$) с ориентацией (111). Для плёнок $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, $\text{Ge}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ параметр δ обозначает толщину слоя $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$. Установлено, что плёнки $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ имеют более низкую поперечную и продольную теплопроводность, чем плёнки $\text{Ge}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ (рисунок 7), несмотря на большее содержание Si. В дополнение к этому слоистым плёнкам Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами свойственна большая теплопроводность, по сравнению со слоистыми плёнками $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ (за исключением случая поперечного теплопереноса в структурах с $\delta = 2$ нм). При $L > 5$ нм возможно дополнительное снижение поперечной и продольной теплопроводности на $\sim 5\text{--}9\%$ в плёнках $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ по сравнению с плёнками Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами. Данный эффект связан с более интенсивным рассеянием фононов на интерфейсах в структурах $\text{Si}/\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, а также перераспределением весов спектральных пиков плотностей состояний фононов в высокочастотную область, которая менее эффективна в теплопереносе.



a – поперечная теплопроводность структур с $\delta = 2$ нм; b – поперечная теплопроводность структур с $\delta = 4$ нм; v – продольная теплопроводность структур с $\delta = 2$ нм; z – продольная теплопроводность структур с $\delta = 4$ нм

Рисунок 7 – Зависимости поперечной и продольной теплопроводности от толщины (111)-ориентированных слоистых структур с различной толщиной δ при 300 К

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Показано, что в слоистых плёнках Si/Ge с резкими интерфейсами более существенное снижение теплопроводности при уменьшении количества периодов (N) имеет место при поперечном теплопереносе по сравнению с продольным. Среди всех рассмотренных ориентаций наибольшее снижение поперечной (с 6,36 до 0,36 Вт/(м·К)) и продольной (с 19,7 до 5,12 Вт/(м·К)) теплопроводности свойственно слоистым плёнкам Si/Ge с ориентацией (001) соответственно вдоль направлений [001] и $[\bar{1}10]$. Снижение поперечной теплопроводности обусловлено сокращением длины свободного пробега фононов до толщины плёнки, из-за чего фононы рассеиваются преимущественно поверхностью, тогда как при продольном теплопереносе длина свободного пробега не ограничена толщиной плёнки, а роль поверхности в рассеянии фононов зависит от степени их поверхностной локализации [1–А; 2–А; 3–А; 5–А; 7–А; 8–А; 9–А].

2. Установлено, что более существенное влияние ориентации слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами на их теплопроводность имеет место при продольном теплопереносе по сравнению с поперечным теплопереносом. Для плёнок с ориентациями (001), (110) и (111) отличие наименьшей и наибольшей продольной теплопроводности вдоль различных кристаллографических направлений может достигать 17,4 Вт/(м·К) для слоистой плёнки с одним периодом, тогда как отличие поперечной теплопроводности для различных ориентаций составляет всего около 1 Вт/(м·К) для нескольких десятков периодов. Значительное влияние ориентации при продольном теплопереносе обусловлено различной степенью локализации фононов на поверхности и интенсивностью рассеяния фононов на интерфейсах, которые зависят от толщины плёнки и количества периодов. Наиболее эффективное рассеяние фононов при продольном теплопереносе имеет место, когда димеры и Si–Ge-связи на интерфейсах лежат в плоскости, параллельной направлению распространения теплового потока. Влияние ориентации при поперечном теплопереносе имеет место в случае когерентного теплопереноса, что связано с различием СДСП фононов [1–А; 2–А; 3–А; 7–А; 8–А; 9–А].

3. Выявлено, что в слоистых плёнках Si/Ge с резкими интерфейсами увеличение количества периодов (N) приводит к пересечению зависимостей для слоистых плёнок Si/Ge, обладающих наименьшей теплопроводностью, что характерно как для поперечного, так и продольного теплопереноса. В случае поперечного теплопереноса слоистые плёнки с ориентацией (001) характеризуются наименьшей теплопроводностью при N менее 40 (0,36–4,71 Вт/(м·К)), тогда как при N более 40 наименьшей теплопроводностью обладают плёнки с (111) ориентацией (5,43 Вт/(м·К)). Для случая продольного теплопереноса наименьшая теплопроводность свойственна

слоистым плёнкам вдоль направления $(001)/[\bar{1}10]$ при N от 1 до 4 (5,12–11,6 Вт/(м·К)), в то время как при N более 6 наименьшей теплопроводностью характеризуются плёнки вдоль направления $(110)/[001]$ (13,2–15,7 Вт/(м·К)). Данный эффект обусловлен различием скорости насыщения «протяженных» фононов, зависящей от групповой скорости и скорости рассеяния фононов (или их производной величины – длины свободного пробега) [2–А].

4. Установлено, что только при поперечном теплопереносе существует эффективная толщина диффузионно-перемешанных интерфейсов (δ), при которой теплопроводность (001) -, (110) - и (111) -ориентированных слоистых плёнок Si/Ge ниже на 7,9–17,3 %, чем у плёнок $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ с эквивалентной толщиной. Поперечная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с $\delta = 4$ МС остается ниже 1,5 Вт/(м·К) при толщине плёнок от ~ 2 до ~ 20 нм для всех рассматриваемых ориентации, тогда как наименьшая продольная теплопроводность (1,7 Вт/(м·К)) свойственна плёнкам $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ с толщиной ~ 2 нм вдоль направлений $(001)/[\bar{1}10]$ и $(110)/[001]$. При поперечном теплопереносе слоистые плёнки Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами характеризуются меньшей средней групповой скоростью фононов по сравнению с плёнками $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ вследствие более интенсивного рассеяния фононов [4–А; 10–А].

5. Обнаружено, что для слоистых плёнок Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами характерна аномальная зависимость снижения продольной теплопроводности при увеличении толщины плёнок (L) почти для всех рассматриваемых кристаллографических направлений. Исключением является направление $(001)/[\bar{1}10]$, для которого имеет место стандартная зависимость повышения теплопроводности при увеличении толщины плёнки. Эта особенность наиболее выражена при $\delta = 4$ МС, когда продольная теплопроводность снижается в 1,4–2,3 раза в зависимости от ориентации и направления при увеличении L с ~ 2 до ~ 20 нм и более. Обнаруженный эффект связан с конкуренцией механизмов фонон-фононного рассеяния и рассеяния фононов на поверхности, вклады которых соответственно определяются фононным истощением и локализацией фононов на поверхности [4–А].

6. Выявлено, что дополнительное снижение поперечной и продольной теплопроводности на ~ 5 –9 % может быть достигнуто в слоистых плёнках Si/ $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ с $\delta = 4$ МС по сравнению с плёнками Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами, тогда как плёнкам Ge/ $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ свойственна наибольшая теплопроводность среди всех рассмотренных типов слоистых структур. Эта особенность обусловлена более интенсивным рассеянием фононов на интерфейсах в слоистых плёнках Si/ $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$, а также перераспределением весов спектральных пиков плотностей состояний фононов в высокочастотную область, которая менее эффективна в теплопереносе [4–А].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Результаты могут быть использованы при разработке тонкоплёночных термоэлектрических преобразователей энергии на основе кремния и германия с применением кремниевой технологии для питания маломощных датчиков в области микро- и нанoeлектроники, медицины, а также для эффективного отвода тепла от интегральных микросхем и дискретных электронных приборов. Полученные результаты использованы в учебном процессе при чтении курса лекций по дисциплине «Современные проблемы физики конденсированных сред» для магистрантов специальности 1-41 80 03 «Нанотехнологии и наноматериалы» (получен 1 акт о внедрении в учебный процесс кафедры микро- и нанoeлектроники БГУИР).

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ

Статьи в научных изданиях, соответствующих требованиям пункта 19 Положения о присуждении учёных степеней и присвоении учёных званий

1–А. Влияние поверхности и границ раздела на продольный тепловой транспорт в слоистых тонкоплёночных структурах Si/Ge / А. Л. Хомец, И. И. Холяво, И. В. Сафронов, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас // Физика твердого тела. – 2022. – № 5. – С. 564–569.

2–А. Orientation and size effects on phonon thermal conductivity in silicon/germanium multilayer structures / A. L. Khamets, I. I. Khaliava, I. V. Safronov, A. B. Filonov, D. B. Migas // Japanese Journal of Applied Physics. – 2023. – Vol. 62. – № SD0804.

3–А. Влияние морфологии поверхности и границ раздела на продольную фононную теплопроводность в тонкоплёночных структурах Ge(001) и Si/Ge(001) / А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас // Физика и техника полупроводников. – 2023. – № 3. – С. 131–137.

4–А. Effects of Si/Ge superlattice structure with intermixed interfaces on phonon thermal conductivity / A. L. Khamets, I. V. Safronov, A. B. Filonov, D. B. Migas // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2025. – Vol. 165. – P. 116109.

Статьи в сборниках материалов научных конференций

5–А. Влияние ориентации поверхности на теплопроводность тонких плёнок Si/Ge / А. Л. Хомец, И. И. Холяво, Д. Б. Мигас, И. В. Сафронов // Материалы и структуры современной электроники : материалы IX Междунар. науч. конф., Минск, 14–16 окт. 2020 г. / Белорус. гос. ун-т ; редкол.: В. Б. Оджаев (гл. ред.) [и др.]. – Минск : БГУ, 2020. – С. 433–438.

6–А. Влияние фонон-интерфейсного рассеяния на продольную теплопроводность слоистых пленок Si/Ge(111) / А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас // Мокеровские чтения: 15-я международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, 22–23 мая 2024 г.: сборник трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2024. – С. 89–90.

7–А. Анизотропия продольной теплопроводности в (001), (110) и (111)-ориентированных слоистых Si/Ge плёнках / А. Л. Хомец, И. В. Сафронов, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас // Компьютерное проектирование в электронике: сборник трудов Международной научно-практической конференции, Минск, 28 ноября 2024 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники ; редкол.: В. Р. Стемпицкий [и др.]. – Минск, 2024. – С. 54–57.

Тезисы докладов на конференциях

8–А. Хомец, А. Л. Влияние ориентации свободной поверхности в слоистых Si/Ge плёнках на поперечную решеточную теплопроводность / А. Л. Хомец, И. И. Холяво, И. В. Сафронов // Радиотехника и электроника : сборник тезисов докладов 57-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 19–23 апреля 2021 г. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. – Минск : БГУИР, 2021. – С. 108–109.

9–А. Хомец, А. Л. Роль поверхности и границ раздела в продольной фононной теплопроводности слоистых пленок Si/Ge / А. Л. Хомец, И. И. Холяво // Радиотехника и электроника : сборник тезисов докладов 58-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 16–18 апреля 2022 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. – Минск, 2022. – С. 40–42.

10–А. Хомец, А. Л. Влияние эффекта взаимодиффузии на границах раздела на поперечную фононную теплопроводность в слоистых тонкоплёночных структурах Ge/Si(001) / А. Л. Хомец, Д. Б. Мигас // Радиотехника и электроника: сборник материалов 59-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 18–22 апреля 2023 г. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. – Минск, 2023. – С. 121–122.



РЭЗІЮМЭ

Хамец Аляксандр Леанідавіч

Крышталічная структура і рашоткавая цеплаправоднасць свабодных слаістых плёнак Si/Ge нанаметровай таўшчыні

Ключавыя словы: тонкія плёнкі, звышрашоткі, крэмній, германій, рашоткавая цеплаправоднасць, малекулярная дынаміка, механізмы рассеявання фанонаў

Мэта працы: усталяванне заканамернасцей уплыву марфалогіі слаістых плёнак з рэзкімі і дыфузійна-перамяшанымі інтэрфейсамі на папярочную і падоўжную рашоткавую цеплаправоднасць.

Метады даследавання: метады малекулярнай статыкі, метады нераўнаважнай малекулярнай дынамікі, гібрыдны метады Монтэ-Карла / малекулярная дынаміка.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: Устаноўлена, што больш істотны ўплыў арыентацыі слаістых плёнак Si/Ge з рэзкімі інтэрфейсамі на іх цеплаправоднасць мае месца пры падоўжным цеплапераносе ў параўнанні з папярочным цеплапераносам. Выяўлена, што ў слаістых плёнках Si/Ge з рэзкімі інтэрфейсамі павелічэнне колькасці перыядаў прыводзіць да скрыжавання залежнасцяў, якія валодаюць найменшай папярочнай і падоўжнай цеплаправоднасцю. Устаноўлена, што пры папярочным цеплапераносе існуе эфектыўная таўшчыня дыфузійна-перамяшаных інтэрфейсаў (4 манаслоя), пры якой папярочная цеплаправоднасць слаістых плёнак Si/Ge з (001), (110) і (111) арыентацыямі ніжэй на 7,9–17,3 %, чым у плёнак Si_{0,5}Ge_{0,5}. Выяўлена, што ў слаістых плёнках Si/Ge з дыфузійна-перамяшанымі інтэрфейсамі са структурай неўпарадкаванага цвёрдага раствора мае месца аномальная залежнасць, якая складаецца ў зніжэнні падоўжнай цеплаправоднасці пры павелічэнні таўшчыні плёнкі з ~2 да ~20 нм і больш. Вызначана, што плёнкі Si/Si_{0,5}Ge_{0,5}, якія змяшчаюць больш цеплаправодныя пласты Si, маюць ніжэйшую на ~5–9 % папярочную і падоўжную цеплаправоднасць у параўнанні з плёнкамі Ge/Si_{0,5}Ge_{0,5}.

Рэкамендацыі па выкарастанні і галіна ўжывання: вынікі працы могуць быць выкарыстаны пры распрацоўцы танкаплёнкавых тэрмаэлектрычных пераўтваральнікаў энергіі на аснове крэмнію і германію з ужываннем крэмніевай тэхналогіі.

РЕЗЮМЕ

Хомец Александр Леонидович

Кристаллическая структура и решёточная теплопроводность свободных слоистых плёнок Si/Ge нанометровой толщины

Ключевые слова: тонкие плёнки, сверхрешётки, кремний, германий, решёточная теплопроводность, молекулярная динамика, механизмы рассеяния фононов

Цель работы: установление закономерностей влияния морфологии слоистых плёнок Si/Ge с резкими и диффузионно-перемешанными интерфейсами на поперечную и продольную решёточную теплопроводность.

Методы исследования: метод молекулярной статики, метод неравновесной молекулярной динамики, гибридный метод Монте-Карло/молекулярная динамика.

Полученные результаты и их новизна: установлено, что более существенное влияние ориентации слоистых плёнок Si/Ge с резкими интерфейсами на их теплопроводность имеет место при продольном теплопереносе по сравнению с поперечным теплопереносом. Выявлено, что в слоистых плёнках Si/Ge с резкими интерфейсами увеличение количества периодов приводит к пересечению зависимостей, обладающих наименьшей поперечной и продольной теплопроводностью. Установлено, что при поперечном теплопереносе существует эффективная толщина диффузионно-перемешанных интерфейсов (4 монослоя), при которой поперечная теплопроводность слоистых плёнок Si/Ge с ориентациями (001), (110) и (111) ниже на 7,9–17,3 %, чем у плёнок $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$. Обнаружено, что в слоистых плёнках Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами со структурой неупорядоченного твёрдого раствора имеет место аномальная зависимость, заключающаяся в снижении продольной теплопроводности при увеличении толщины плёнки с ~2 до ~20 нм и более. Установлено, что слоистые плёнки Si/Si_{0,5}Ge_{0,5} имеют более низкую поперечную и продольную теплопроводность на ~5–9 % по сравнению с плёнками Si/Ge с диффузионно-перемешанными интерфейсами.

Рекомендации по практическому использованию и область применения: результаты могут быть использованы при разработке тонкоплёночных термоэлектрических преобразователей энергии на основе кремния и германия с применением кремниевой технологии.

SUMMARY

Khamets Aliaksandr Leanidavich

Crystal structure and lattice thermal conductivity of free layered Si/Ge films of nanometer thickness

Keywords: thin films, superlattices, silicon, germanium, lattice thermal conductivity, molecular dynamics, phonon scattering mechanisms

The purpose of this work is to establish patterns of influence of the morphology of layered Si/Ge films with sharp and diffusion-mixed interfaces on cross- and in-plane lattice thermal conductivity.

Research methods: molecular statics method, non-equilibrium molecular dynamics method, hybrid Monte-Carlo / molecular dynamics method.

The results obtained and their novelty: it was found that the orientation of layered Si/Ge films with sharp interfaces has a more significant effect on their thermal conductivity during in-plane heat transfer compared to cross-plane heat transfer. It was shown that in layered Si/Ge films with sharp interfaces, increasing the number of periods leads to an intersection of the dependencies with the lowest cross-plane and in-plane thermal conductivities. It was found that, for cross-plane heat transfer, there is an effective thickness of diffusion-mixed interfaces (4 monolayers), at which the cross-plane thermal conductivity of layered Si/Ge films with orientations (001), (110) and (111) is lower by 7,9–17,3 % than that of $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ films. It was discovered that layered Si/Ge films with diffusion-mixed interfaces with a disordered solid solution structure exhibit an anomalous dependence consisting of a decrease in the the in-plane thermal conductivity with an increase in film thickness from ~2 to ~20 nm and more. It was found that Si/ $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ films have a lower cross-plane and in-plane thermal conductivity by ~5–9 % compared to Si/Ge films with diffusion-mixed interfaces.

Recommendations for use and application field: the results can be used in the development of thin-film thermoelectric energy converters based on silicon and germanium using silicon technology.

Научное издание

**Хомец
Александр Леонидович**

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И РЕШЁТОЧНАЯ
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ СВОБОДНЫХ СЛОИСТЫХ ПЛЁНОК Si/Ge
НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ**

**Автореферат
диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук
по специальности 05.16.08 – нанотехнологии и наноматериалы
(материалы для электроники и фотоники)**

Подписано в печать 05.03.2026. Формат 60×84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс.
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 1,63. Уч.-изд. л. 1,4. Тираж 60 экз. Заказ 34.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014.
Ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск