

ПАДЕНИЕ ФОНОННОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В СЕГМЕНТИРОВАННЫХ Si/Ge НАНОНИТЯХ

Калина ИСАКОВА

Молдавский государственный университет

Выполнены теоретические исследования фононного теплового потока в Si/Ge сегментированных нанонитях. Энергетический спектр фононов был рассчитан в рамках модели молекулярной динамики колебаний решетки "face-centered cubic cell". Решеточная теплопроводность была рассчитана с помощью транспортного уравнения Больмана. Рост локализации фононов, обусловленный перестройкой энергетического спектра, приводит к существенному падению решеточной теплопроводности в сегментированных нанонитях по сравнению с обычными нанонитями. Этот эффект связан с исключением из теплового транспорта захваченных фононных мод. Как следствие, прогнозируется падение фононного теплового потока в широком диапазоне температур для сегментированных нанонитей. Полученные результаты показывают, что сегментированные нанонити являются перспективными для термоэлектрических применений.

Ключевые слова: *фононы, сегментированные нанонити, кремний, теплопроводность.*

CĂDEREA TERMOCONDUCTIBILITĂȚII FONONICE ÎN NANOFIRELE SEGMENTATE Si/Ge

A fost cercetat teoretic fluxul termic în nanofire omogene din siliciu și nanofire segmentate Si/Ge. Spectrul energetic al fononilor a fost calculat în cadrul modelului molecular-dinamic al oscilațiilor rețelei cristaline „face-centered cubic cell”. Conductibilitatea termică de rețea a fost calculată prin soluționarea ecuației Boltzman de transport. Localizarea intensă a fononilor condiționată de redistribuirea spectrului energetic duce la diminuarea esențială a conductibilității termice de rețea în nanofire segmentate în comparație cu nanofirele omogene. Acest efect este legat cu excluderea modelor captate în segmentele nanofirului din transportul de căldură. Drept consecință, scăderea fluxului termic fononic în diapazonul larg de temperaturi este prezis pentru nanofirele Si/Ge segmentate. Rezultatele obținute atestă că nanofirele segmentate sunt de perspectivă pentru aplicații termoelectrice.

Cuvinte-cheie: *fononi, nanofire segmentate, siliciu, conductibilitate termică.*

REDUCTION OF PHONON THERMAL CONDUCTIVITY IN Si/Ge NANOWIRES

In this work phonon heat flux in Si and Si/Ge segmented nanowires has been theoretically investigated. The phonon energy spectra were calculated in the framework of the face-centered cubic cell model of the lattice dynamics. The phonon thermal conductivity was calculated using Boltzmann transport equation. Increasing of phonon localization due to energy spectra redistribution results in suppression of the phonon thermal flux in these nanowires as compared to the generic nanowires. As a result the drop of the phonon thermal conductivity in the large temperature range is predicted for Si/Ge segmented nanowires. These results indicate that segmented nanowires are perspective candidates for thermoelectric applications.

Keywords: *phonons, segmented nanowires, silicon, thermal conductivity.*

Prezentat la 14.07.2015

Publicat: septembrie 2015