

УДК 621.315.592

## Влияние морфологии поверхности и границ раздела на продольную фононную теплопроводность в тонкопленочных структурах Ge(001) и Si/Ge(001)

© А.Л. Хомец<sup>1</sup>, И.В. Сафронов<sup>2</sup>, А.Б. Филонов<sup>1</sup>, Д.Б. Мигас<sup>1,3,¶</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220089 Минск, Беларусь

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

<sup>3</sup> Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, 115409 Москва, Россия

¶ E-mail: migas@bsuir.by

Поступила в Редакцию 24 марта 2023 г.

В окончательной редакции 29 марта 2023 г.

Принята к публикации 29 марта 2023 г.

Методом неравновесной молекулярной динамики проведено исследование продольной фононной теплопроводности при 300 К в наноразмерных гомогенных Ge(001) и слоистых Si/Ge(001) пленках с  $p(2 \times 1)$  поверхностной реконструкцией вдоль различных направлений. Установлено появление анизотропии теплового транспорта в рассматриваемых пленках, которая обусловлена как морфологией поверхности, так и резкими Si/Ge границами раздела. Для направления, когда димеры и Si–Ge-связи на границе раздела лежат в плоскости, параллельной направлению теплового потока, наблюдается наименьшая теплопроводность ( $\sim 5\text{--}18$  Вт/(м·К) в диапазоне от  $\sim 1$  до 27 нм). Показано, что для пленок с толщинами  $> 13$  нм для всех направлений слоистые пленки обладают меньшей теплопроводностью по сравнению с гомогенными. При этом роль морфологии поверхности и границ раздела сводится к различной степени локализации фононов и компенсации более теплопроводящих слоев Si соответственно.

**Ключевые слова:** теплопроводность, молекулярная динамика, Si/Ge тонкие пленки, поверхность, границы раздела.

DOI: 10.21883/FTP.2023.03.55624.4742

### 1. Введение

Основной недостаток известных термоэлектрических материалов заключается в их низкой эффективности преобразования тепловой энергии в электрическую [1]. Эффективность термоэлектрического преобразования энергии можно оценить с помощью безразмерного коэффициента термоэлектрической добротности  $ZT = S^2 \sigma T / (\kappa_L + \kappa_e)$ , где  $S$  — коэффициент Зеебека,  $\sigma$  — электропроводность материала,  $\kappa_L, \kappa_e$  — фононная (решеточная) и электронная составляющие теплопроводности материала,  $T$  — рабочая температура. Одним из ключевых подходов к повышению термоэлектрической добротности полупроводниковых материалов является снижение их фононной теплопроводности [2]. Материалы пониженной размерности на основе Si и Ge, такие как тонкие пленки, нанопроволоки, вызывают большой интерес у исследователей в последние несколько десятилетий из-за повышенного эффективного рассеяния фононов на границах раздела и поверхности [3]. Значительное снижение теплопроводности в сравнении с объемными Si и Ge (теплопроводность которых равна 140 [4] и 55 Вт/(м·К) [5] соответственно) в подобных наноструктурах (вплоть до 0.33 Вт/(м·К) для слоистой

Au/Si-пленки с общей толщиной 87 нм [6]) может существенно увеличить их коэффициент термоэлектрической добротности  $ZT$ .

В ряде работ исследовалась, в частности, анизотропия фононной теплопроводности в гомогенных Si [7–9], Ge [10–12], а также в слоистых Si/Ge-пленках [12,13] и объемных сверхрешетках [12–16]. Среди перечисленных работ различные ориентации поверхности и (или) границ раздела в пленках рассматривались только в [7–9,12,13]. Так, в (001), (110), (111) и (112) ориентированных тонких Si-пленках (112)/[111] направление характеризуется наибольшим тепловым сопротивлением [7] или наименьшей продольной теплопроводностью [9]. Среди трех основных поверхностных ориентаций (001) ([100] направление), (110) ([100] и  $[0\bar{1}1]$  направления) и (111) ([110] и [112] направления) обнаружена наименьшая продольная теплопроводность для тонких Si мембран в направлении (001)/[100] [8]. Изучение продольной фононной теплопроводности в тонкопленочных структурах на основе Si и Ge с ориентациями (001), (110) и (111) вдоль одного  $[\bar{1}10]$  кристаллографического направления позволило выявить, что гомогенные Ge(001) и слоистые Si/Ge(001) пленки обладают наименьшими значениями теплопроводности [13].

В работе [12] для аналогичных тонкопленочных структур нами были дополнительно рассмотрены и другие направления, однако варианты (001)/ $[\bar{1}10]$  с общей толщиной до 10 нм показали наиболее низкую продольную теплопроводность.

Для тонких алмазных пленок с ориентацией (001) показано наличие существенной анизотропии продольной теплопроводности вдоль эквивалентных направлений  $\langle 110 \rangle$  (т.е. [110] и  $[\bar{1}10]$ ) [17]. В частности, для типичной  $p(2 \times 1)$  реконструкции C(001) пленки толщиной 2.1 нм коэффициент анизотропии составил 1.8, т.е. теплопроводность в случае направления теплового потока поперек димерам почти в 2 раза больше, чем вдоль димеров [17]. Для тонких Si- и Ge-пленок, а также для слоистых Si/Ge-пленок подобные исследования не проводились. Таким образом, цель настоящей работы — исследование влияния морфологии поверхности и границ раздела на продольную фононную теплопроводность в гомогенных Ge(001) и слоистых Si/Ge(001) пленках с  $p(2 \times 1)$  реконструкцией поверхности.

## 2. Материалы и методы

В данной работе рассматриваются (001) ориентированные гомогенные Ge, а также слоистые Si/Ge-пленки в виде симметричных периодических сверхрешеток с резкими границами раздела (когерентное сопряжение фаз без учета взаимодиффузии). Для всех пленок проводилась  $p(2 \times 1)$  реконструкция поверхности путем формирования рядов димеров Si–Si или (или) Ge–Ge. Для слоистой Si/Ge-пленки слои Si и Ge имели толщину по 4 моноатомных слоя (или равны одному параметру решетки для Si 0.543 нм, а для Ge 0.566 нм). Вместе эти слои образуют бислои Si/Ge с периодом 1.1 нм, число которых варьировалось от  $n = 1$  до 24, что эквивалентно толщине от 1.1 до  $\sim 27$  нм. Выбор такого периода связан с наименьшей достигаемой продольной теплопроводностью [12]. Для визуализации и генерации данных структур использовались программы Jmol [18] и OVITO [19].

Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Терсоффа [20]. Для всех структур использовались трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором  $\sim 5$  нм. Предварительно все структуры оптимизировались методом молекулярной статики с помощью программного пакета LAMMPS [21]. Для определения коэффициентов фононной теплопроводности использовался метод неравновесной молекулярной динамики (пакет LAMMPS [21]). Приведение структур в термодинамически равновесное состояние при  $T = 300$  К осуществлялось с помощью изобарно-изотермического и канонического ансамблей в течение 0.9 и 0.1 нс соответственно, а также с помощью микроканонического ансамбля в течение 2 нс. Для создания температурного градиента на расстоянии половины

длины суперъчейки расставлялись термостаты Ланжевена (холодный и горячий при 290 и 310 К соответственно). Для нивелирования флуктуаций температуры число атомов в обоих термостатах было одинаковым и равно  $\sim 6000$  атомов. Значение коэффициента фононной теплопроводности определялось из закона Фурье спустя 2 нс:

$$\kappa_L = -\frac{E}{2S_{\text{sec}}t(dT/dx)},$$

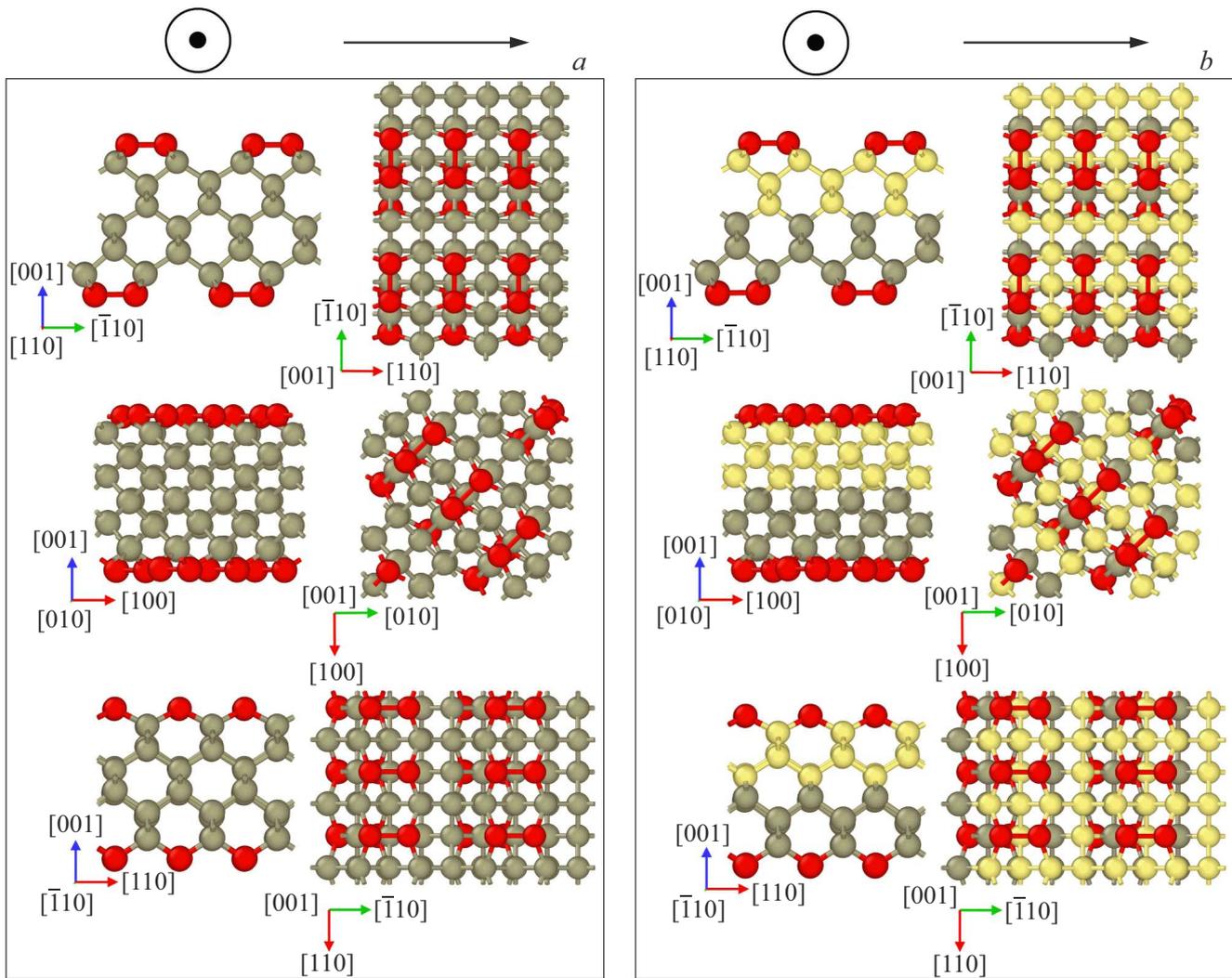
где  $E$  — перенесенная тепловая энергия; 2 — коэффициент, связанный с распространением теплового потока в двух направлениях;  $t$  — время моделирования;  $S_{\text{sec}}$  — площадь поперечного сечения;  $dT/dx$  — градиент температуры в выбранном кристаллографическом направлении.

При моделировании продольной фононной теплопроводности все рассматриваемые структуры имели приблизительно одинаковый размер суперъчейки (немного более 100 нм), чтобы добиться режима линейного отклика между обратными величинами теплопроводности и размера суперъчейки [22]. Расчет дисперсионных кривых, групповых скоростей фононов и проекционных колебательных плотностей состояний (нормированных) проводился с помощью программ phonoLAMMPS [23] и Phonopy [24]. Для определения силовых констант при 300 К использовалась программа Dynaphopy [25].

## 3. Результаты и обсуждение

Так как потенциал Терсоффа не учитывает перераспределение электронной плотности, он не способен воспроизводить стандартные, экспериментально наблюдаемые  $p(2 \times 2)$  или  $c(4 \times 2)$  реконструкции Si(001) и Ge(001) поверхностей, где учитывается наклон димеров к плоскости поверхности [26]. В нашем случае все димеры расположены параллельно поверхности и изначально использовалась  $p(2 \times 1)$  реконструкция поверхности, на которой можно выделить три основных низкоиндексных направления  $[\bar{1}10]$ , [010] и [110] (см. рис. 1). Очевидно, что направления  $[\bar{1}10]$  и [110] действительно неэквивалентны из-за образования рядов димеров. Аналогичный вывод характерен и для резких границ раздела Si/Ge, для которых Si–Ge-связи направлены вдоль  $[\bar{1}10]$  (рис. 1, b), что также может привести к появлению анизотропии теплопроводности.

На основании результатов расчетов установлено (рис. 2), что продольная теплопроводность как для гомогенных Ge, так и слоистых Si/Ge-пленок минимальна и максимальна соответственно вдоль направлений  $[\bar{1}10]$  и [110], указывая на наличие анизотропии. Наибольший коэффициент анизотропии ( $\gamma = \kappa_L^{[110]}/\kappa_L^{[\bar{1}10]}$ ) составляет 3.1 и 2.3 соответственно для слоистых Si/Ge- и гомогенных Ge-пленок при толщинах  $\sim 1$  нм. С увеличением толщины пленок обоих типов до  $\sim 27$  нм  $\gamma$  снижается до 1.1.

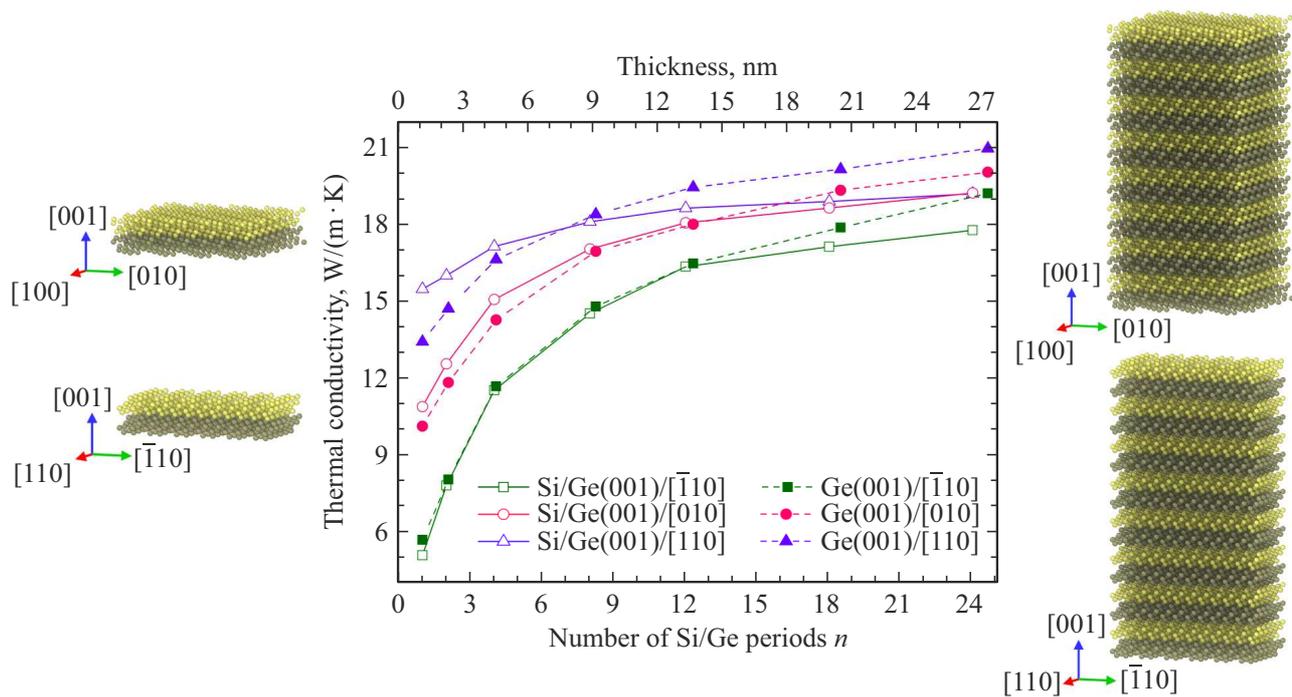


**Рис. 1.** Модели структур Ge(001) (a) и Si/Ge(001) (b) пленок с  $p(2 \times 1)$  реконструкцией поверхности в двух проекциях вдоль  $[110]$ ,  $[010]$  и  $[\bar{1}10]$  направлений. Направления распространения теплового потока указаны на пиктограммах. Димеры выделены красным цветом. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

При этом наименьшие значения теплопроводности вдоль  $[\bar{1}10]$  равны соответственно 5.72 и 5.12 Вт/(м·К) для гомогенных Ge- и слоистых Si/Ge-пленок при толщине  $\sim 1$  нм, а при увеличении толщины — нелинейно выходят на насыщение чуть более 18 Вт/(м·К), что более детально было показано ранее [13]. Также выявлено, что исключительно для направления  $[\bar{1}10]$  продольная теплопроводность для слоистых Si/Ge- и гомогенных Ge-пленок сопоставимы в диапазоне толщин до  $\sim 9$  нм в отличие от направлений  $[010]$  и  $[110]$  (рис. 2). При этом для всех кристаллографических направлений при толщине пленок  $> 13$  нм слоистые Si/Ge-пленки обладают меньшей фононной теплопроводностью в сравнении с гомогенными Ge-пленками, что может быть обусловлено эффективным рассеянием фононов на границах раздела. Для пленок с толщиной  $\sim 27$  нм разница в теплопроводности между гомогенными Ge- и слоистыми Si/Ge-

пленками для направлений  $[110]$ ,  $[010]$  и  $[\bar{1}10]$  составляет  $\sim 4$ , 9 и 8% соответственно.

Очевидно, что такая высокая степень анизотропии теплопроводности обусловлена различной морфологией поверхности и границ раздела относительно направления распространения теплового потока. При этом усиление анизотропии в слоистых Si/Ge-пленках по сравнению с гомогенными Ge-пленками (рис. 2) обусловлено границами раздела, которые либо компенсируют, либо не компенсируют вклад более теплопроводящих Si-слоев [12,13]. Снижение коэффициента анизотропии с увеличением толщины рассматриваемых пленок может быть связано с уменьшением роли поверхности, которая постепенно нивелируется [8,12,13,27]. Как показано в [12,13], при (001) ориентации поверхность играет первостепенную роль в слоистых Si/Ge-пленках с общей толщиной до  $\sim 10$  нм, в то время как при



**Рис. 2.** Продольная фоновая теплопроводность при 300 К гомогенных Ge- и слоистых Si/Ge-пленок с ориентацией (001) от количества периодов (или общей толщины пленки по верхней оси) вдоль различных кристаллографических направлений. Модели слоистых структур при различном  $n$  показаны на вставках.

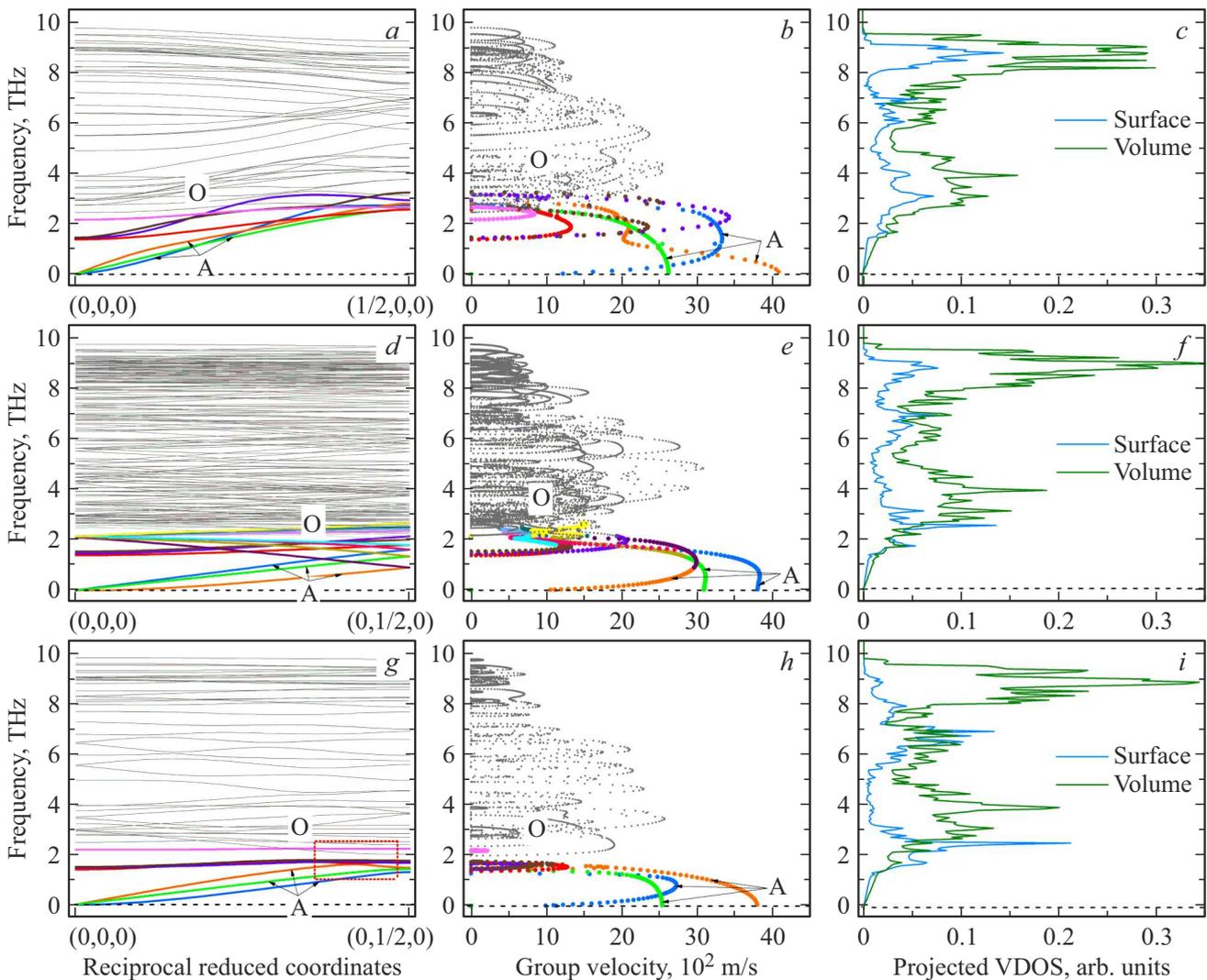
увеличению толщины имеет место изменение основного механизма рассеяния с фонов-поверхностного на фонов-интерфейсный. Последнее отражено на зависимостях, изображенных на рис. 2, в виде расхождения кривых для гомогенных и слоистых пленок (при толщинах  $> 13$  нм или числе периодов более 12), где для первых наблюдается дальнейшее повышение теплопроводности, а для последних — этот рост уже замедляется.

Для корректной интерпретации полученных результатов также приведен анализ дисперсионных кривых, частотных зависимостей групповых скоростей и парциальных колебательных плотностей состояний фононов для гомогенной Ge (рис. 3) и слоистой Si/Ge (рис. 4) пленок с наименьшими толщинами. Как видно из рис. 3,  $a$  —  $4, a$ ,  $3, d$  —  $4, d$  и  $3, g$  —  $4, g$ , для обоих типов пленок акустические ветви достигают больших значений по частоте для [110] направления по сравнению с [010] и  $\bar{1}10$  направлениями. Следует отметить, что для случая  $\bar{1}10$  также наблюдается сильное акустико-оптическое сцепление (выделено пунктирными рамками на рис. 3 и 4), приводящее к сильному резонансному рассеянию [28,29]. Как следствие, наибольшие и наименьшие групповые скорости фононов свойственны [110] (рис. 3,  $b$  —  $4, b$ ) и  $\bar{1}10$  (рис. 3,  $h$  —  $4, h$ ) направлениям соответственно, что приводит к наблюдаемому различию теплопроводности (рис. 2).

Нормированные колебательные плотности состояний, изображенные на рис. 3,  $c$  —  $4, c$ ,  $3, f$  —  $4, f$ ,  $3, i$  —  $4, i$ , демонстрируют существенный вклад поверхностных мод

в общую плотность состояний по сравнению с объемными модами. Именно для  $\bar{1}10$  направления наблюдается наибольшее несоответствие фоновых спектров поверхностных и объемных атомов, заключающееся в смещении пиков для поверхностных атомов в сторону более низких частот (рис. 3,  $i$  —  $4, i$ ). В частности, увеличенные значения плотности состояний в окрестности 2.5 ТГц (рис. 3,  $i$  —  $4, i$ ) свидетельствуют о локализации фононов на поверхности [30], что приводит к снижению теплопроводности таких гомогенных Ge- и слоистых Si/Ge-пленок.

Фононные спектры интерфейсных и поверхностных атомов сопоставимы в слоистой Si/Ge-пленке только для [110] направления (рис. 4,  $c$ ). Наименьшее и наибольшее рассогласование фоновых спектров интерфейсных и объемных атомов характерны соответственно для [110] и  $\bar{1}10$  направлений (рис. 4,  $c$  и  $i$ ). В случае  $\bar{1}10$  направления наблюдается существенное подавление пиков во всем диапазоне частот, а также „обрезка“ спектра со стороны высоких частот ( $\sim 14$ – $16$  ТГц) со смещением пиков в сторону низких частот на  $\sim 2$  ТГц, что также может являться следствием более эффективного фонов-интерфейсного рассеяния [31]. Таким образом, наиболее эффективное фонов-интерфейсное рассеяние наблюдается в случаях, когда Si–Ge-связи на границе раздела лежат в плоскости, параллельной направлению распространения теплового потока. Отметим, что в первом случае ( $\bar{1}10$ ) границы раздела компенсируют, а во втором случае ([110]) не компенсируют (в диапазоне



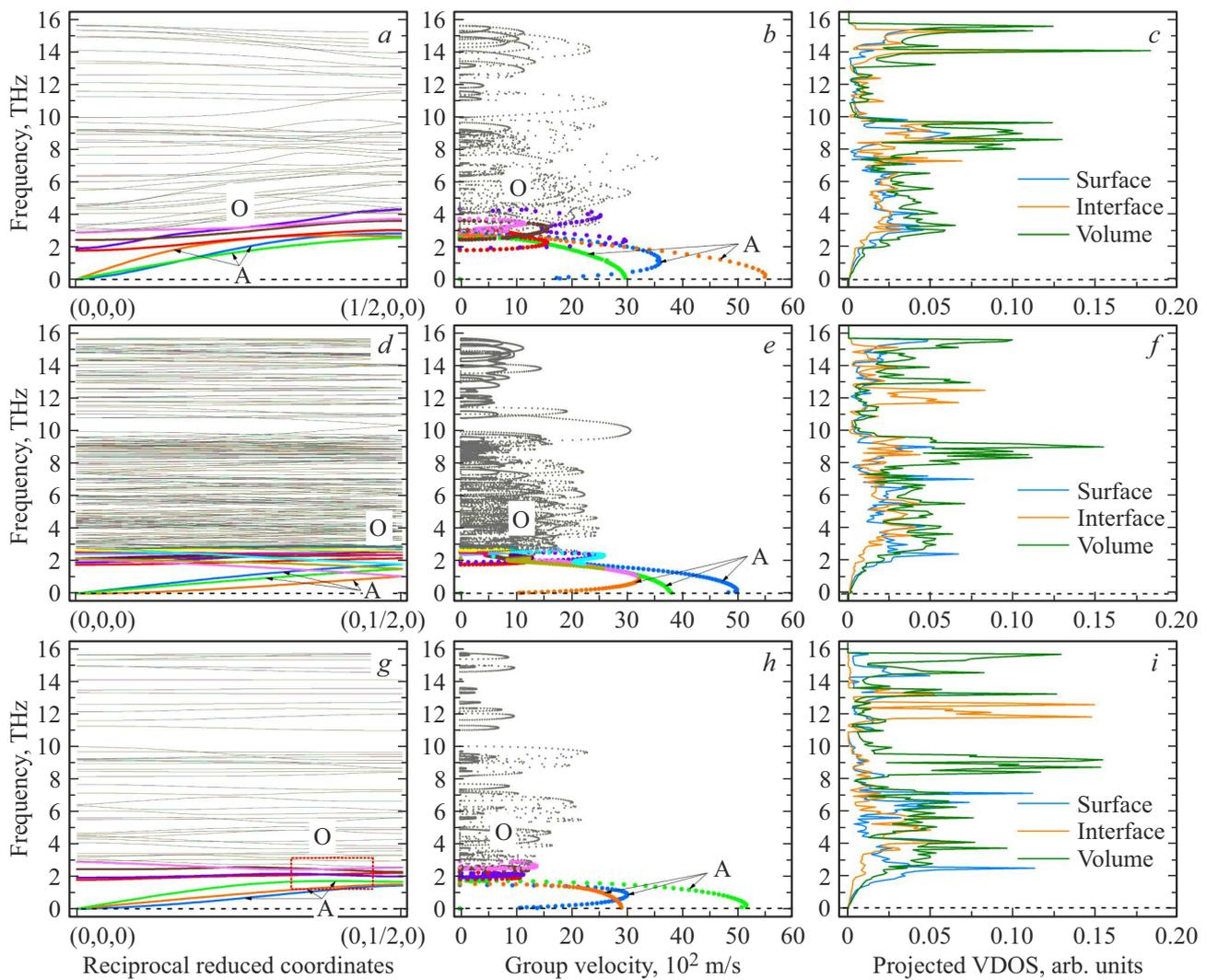
**Рис. 3.** Дисперсионные кривые (a), (d), (g), групповые скорости (b), (e), (h) и парциальные колебательные плотности состояний (c), (f), (i) фононов для случая однородной пленки Ge с толщиной 1.1 нм при 300 К. Акустические (A) и оптические (O) ветви обозначены. Направление  $[110]$  соответствует рисункам (a)–(c),  $[010]$  — (d)–(f) и  $[\bar{1}10]$  — (g)–(i).

до  $\sim 9$  нм) вклад более теплопроводящих Si-слоев, что согласуется с данными рис. 2 при сравнении теплопроводности однородных и гетерогенных пленок.

В отличие от [17], где была обнаружена анизотропия продольной теплопроводности в наноразмерных C(001) пленках вдоль  $[110]$  и  $[\bar{1}10]$  направлений, нами этот эффект был выявлен не только для однородных Ge(001), но и для слоистых Si/Ge(001) пленок. Коэффициенты анизотропии для Ge(001) и C(001) пленок эквивалентных толщин ( $\sim 2$  нм) совпадают ( $\gamma \cong 1.8$ ), однако при одинаковом числе атомных слоев (24)  $\gamma$  для германиевой пленки уже ниже по сравнению с алмазной ( $\gamma \sim 1.6$ ) вследствие большего параметра решетки. В то время как для Si/Ge(001) пленок эквивалентной толщины коэффициент анизотропии выше ( $\gamma \cong 2.1$ ), что подчеркивает наряду с поверхностью роль границ раздела в возникновении анизотропии.

## 4. Заключение

С помощью метода неравновесной молекулярной динамики для (001) ориентированных однородных Ge- и слоистых Si/Ge-пленок толщиной от 1.1 до  $\sim 27$  нм с поверхностной реконструкцией  $p(2 \times 1)$  было исследовано влияние морфологии поверхности и границ раздела на продольную фононную теплопроводность вдоль направлений  $[110]$ ,  $[010]$  и  $[\bar{1}10]$  при 300 К. Вследствие более низких групповых скоростей фононов и наличия сильного акустико-оптического сцепления направление  $[\bar{1}10]$ , при котором димеры расположены вдоль направления теплового потока, демонстрирует самые низкие значения теплопроводности как для однородных Ge- ( $\sim 6$ – $19$  Вт/(м·К)), так и для слоистых Si/Ge-пленок ( $\sim 5$ – $18$  Вт/(м·К)) во всем диапазоне толщин пленок. Также в случае направления  $[\bar{1}10]$  в слоистых Si/Ge-пленках, когда Si–Ge-связи на границе раздела



**Рис. 4.** Дисперсионные кривые (a), (d), (g), групповые скорости (b), (e), (h) и частичные колебательные плотности состояний (c), (f), (i) фононов для случая слоистой Si/Ge пленки с общей толщиной 1.1 нм (или  $n = 1$ ) при 300 К. Акустические (A) и оптические (O) ветви обозначены. Направление [110] соответствует рисункам (a)–(c), [010] — (d)–(f) и  $[\bar{1}\bar{1}0]$  — (g)–(i).

лежат в плоскости, параллельной тепловому потоку, наблюдается компенсация вклада более теплопроводящих Si-слоев за счет эффективного рассеяния фононов резкими границами раздела. Максимальные значения теплопроводности свойственны ( $\sim 16\text{--}19$  Вт/(м·К) в диапазоне толщин  $\sim 1\text{--}27$  нм) в случае распространения теплового потока в направлении, перпендикулярном плоскости с димерами и Si–Ge-связями на границе раздела. С увеличением общей толщины слоистых пленок выше  $\sim 13$  нм (число периодов более 12) обнаружено изменение основного механизма рассеяния с фонов-поверхностного на фонов-интерфейсный.

Из полученных результатов можно также заключить, что в случае других поверхностных реконструкций и ориентаций в тонких пленках на основе Si и Ge возможно наблюдение аналогичного эффекта, связанного с проявлением сильной анизотропии для теплового

транспорта. Для более достоверной оценки эффективности подобных материалов для термоэлектрических применений в дальнейшем необходимо оценить влияние структурных дефектов, а также окисления свободных поверхностей на фоновую теплопроводность.

### Благодарности

При проведении работ были использованы ресурсы высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках научной государственной программы Республики Беларусь „Материаловедение, новые материалы и технологии“, а также поддержана программой Приоритет-2030 НИЯУ МИФИ.

**Конфликт интересов**

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**Список литературы**

- [1] Z.-G. Shen, L.-L. Tian, X. Liu. *Energy Convers. Management*, **195**, 1138 (2019).
- [2] G.J. Snyder, E.S. Toberer. *Complex Thermoelectric Materials*, **7**, 105 (2008).
- [3] J.A. Pérez-Taborda, O. Caballero-Calero, M. Martín-González. *New Research on Silicon — Structure, Properties, Technology* (InTechOpen, London, 2017).
- [4] H.R. Shanks, P.D. Maycock, P.H. Sidles, G.C. Danielson. *Phys. Rev.*, **130** (5), 1743 (1963).
- [5] A.F. Ioffe. *Canadian J. Phys.*, **34** (12A), 1342 (1956).
- [6] E. Dechaumphai, D. Lu, J.J. Kan, J. Moon, E.E. Fullerton, Z. Liu, R. Chen. *Nano Lett.*, **14** (5), 2448 (2014).
- [7] P. Heino. *Eur. Phys. J. B*, **60**, 171 (2007).
- [8] Z. Aksamija, I. Knezevic. *Phys. Rev. B*, **82** (4), 045319 (2010).
- [9] H. Karamitaheri, N. Neophytou, H. Kosina. *J. Appl. Phys.*, **113**, 204305 (2013).
- [10] Z.H. Wang, M.J. Ni. *Heat Mass Transfer*, **47** (4), 449 (2011).
- [11] X. Zhang, X. Wu. *Comput. Mater. Sci.*, **123**, 40 (2016).
- [12] A.L. Khamets, I.I. Khaliava, I.V. Safronov, A.B. Filonov, D.B. Migas. *Japan. J. Appl. Phys.*, **62**, SD0804 (2023).
- [13] А.Л. Хомец, И.И. Холяво, И.В. Сафронов, А.Б. Филонов, Д.Б. Мигас. *ФТТ*, **64** (5), 564 (2022).
- [14] J. Garg, G. Chen. *Phys. Rev. B*, **87** (14), 140302 (2013).
- [15] Z. Aksamija, I. Knezevic. *Phys. Rev. B*, **88** (15), 155318 (2013).
- [16] A. Kandemir, A. Ozden, T. Cagin, C. Sevik. *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **18** (1), 187 (2017).
- [17] X. Liu, G. Zhang, Y.-W. Zhang. *Carbon*, **94**, 760 (2015).
- [18] Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D: <http://www.jmol.org/>
- [19] A. Stukowski. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **18**, 015012 (2009).
- [20] J. Tersoff. *Phys. Rev. B*, **39** (8), 5566 (1989).
- [21] S. Plimpton. *J. Comput. Phys.*, **117**, 1 (1995).
- [22] Y. He, I. Savić, D. Donadio, G. Galli. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14** (47), 16209 (2012).
- [23] A. Carreras. (2021), phonoLAMMPS: A python interface for LAMMPS phonon calculations using phonopy (0.8.1), Zenodo (<https://doi.org/10.5281/zenodo.5668319>)
- [24] A. Togo, I. Tanaka. *Scr. Mater.*, **108**, 1 (2015).
- [25] A. Carreras, A. Togo, I. Tanaka. *Comput. Phys. Commun.*, **221**, 221 (2017).
- [26] D.B. Migas, P. Raiteri, L. Miglio, A. Rastelli, H. von Känel. *Phys. Rev. B*, **69**, 235318 (2004).
- [27] X. Wang, B. Huang. *Sci. Rep.*, **4**, 6399 (2014).
- [28] H. Zhu, C. Zhao, P. Nan, X.-m. Jiang, J. Zhao, B. Ge, C. Hiao, Y. Xie. *Chem. Mater.*, **33**, 1140 (2021).
- [29] H. Xie. *Mater. Lab.*, **1**, 220051 (2022).
- [30] F. Sansoz. *Nano Lett.*, **11**, 5378 (2011)
- [31] M. Hu, K.P. Giapis, J.V. Goicochea, X. Zhang, D. Poulidakos. *Nano Lett.*, **11**, 618 (2011).

Редактор Г.А. Оганесян

**Effect of surface morphology and interfaces on longitudinal phonon thermal conductivity in Ge(001) and Si/Ge(001) thin-film structures**

A.L. Khamets<sup>1</sup>, I.V. Safronov<sup>2</sup>, A.B. Filonov<sup>1</sup>, D.B. Migas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 220013 Minsk, Belarus

<sup>2</sup> Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus

<sup>3</sup> National Research Nuclear University MEPhI, 115409 Moscow, Russia

**Abstract** In this work the method of non-equilibrium molecular dynamics was used to study the longitudinal phonon thermal transport at 300 K in nanoscale homogenous Ge(001) and layered Si/Ge(001) thin films with  $p(2 \times 1)$  surface reconstruction along different directions. The appearance of thermal transport anisotropy in the films under consideration, which is due to both the surface morphology and sharp Si/Ge interfaces, has been established. For the direction when the dimers and Si–Ge bonds at the interface lie in a plane parallel to the direction of the heat flow, the lowest thermal conductivity is observed ( $\sim 5\text{--}18\text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$  in the range from  $\sim 1$  to 27 nm). It is shown that for films with thicknesses of more than 13 nm for all directions, layered films have a lower thermal conductivity compared to homogenous ones. In this case, the role of the surface morphology and interfaces is reduced to different degrees of phonon localization and compensation for more heat-conducting Si layers, respectively.