

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики

«Механизм взаимодействия кремния с нитридом галлия»

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 4 курса 4033 группы
направления 03.03.03 «Радиофизика»
института физики
Рулик Ирины Васильевны

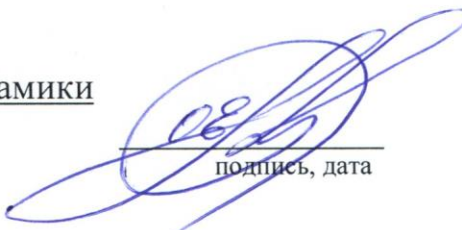
Научный руководитель
Профессор, д.ф.-м.н., доцент



подпись, дата

Г.Н. Тен

Заведующая кафедрой
радиотехники и электродинамики
д.ф.-м.н., профессор



подпись, дата

О.Е. Глухова

Саратов 2026 г.

Введение. В условиях стремительного развития технологий основной задачей является повышение энергоэффективности электронных устройств. Большая часть потребляемой энергии в современных приборах рассеивается в виде тепла, что приводит к снижению их эффективности, а в конечном итоге и к уменьшению срока службы. В этом случае особый интерес представляет возможность преобразования тепловой энергии в электрическую.

Нитрид галлия (GaN) представляет собой полупроводниковый материал, который в последние десятилетия привлекает значительное внимание исследователей и инженеров благодаря своим уникальным физическим и химическим свойствам. Обладая широким запрещённым энергетическим диапазоном, высокой теплопроводностью и устойчивостью к высоким температурам, нитрид галлия находит применение в различных областях, включая электронику, оптоэлектронику и фотонику. GaN стал основой для разработки, так как его свойства делают его идеальным кандидатом для создания высокочастотных и высокоомощных электронных устройств, таких как транзисторы и диоды, что открывает новые горизонты в области энергетики и телекоммуникаций.

На данный момент было показано, что наноструктуры на основе нитрида галлия, интегрированные с кремниевой подложкой, демонстрируют уникальные свойства, позволяющие снизить теплопроводность без ухудшения электропроводности. Исследование механизма взаимодействия таких композитов на молекулярном уровне необходимо для целенаправленного проектирования новых термоэлектрических материалов. Характеристики нитрида галлия позволяют применять его в составе самых мощных устройств. Например, в управляющей микроэлектронике для быстрых зарядных станций. Благодаря стойкости полученных компонентов восполнение энергии происходит быстрее, чем с помощью современных технологий.

Целью данной дипломной работы является исследование физических механизмов преобразования тепловой энергии в электрическую в гетероструктурах на основе нанокластеров нитрида галлия на кремниевой подложке, а также влияние наноразмерных эффектов на термоэлектрические характеристики системы.

Задачи данной работы:

1. Рассмотреть термоэлектрические эффекты;
2. Сравнить различные модификации эффекта;
3. Рассмотреть свойства нитрида галлия и кремния;
4. Проанализировать роль кремниевой подложки в формировании термоэлектрических свойств системы;
5. Оценить перспективы практического применения исследуемых структур.

Основное содержание работы. В первой главе работы были рассмотрены фундаментальные термоэлектрические эффекты. Эффект Зеебека заключается в возникновении электродвижущей силы (ЭДС) в замкнутой цепи из двух разнородных проводников при наличии разности температур между их контактами. Физическая природа эффекта связана с диффузией носителей заряда от горячего конца к холодному, что приводит к возникновению разности потенциалов. Ключевой характеристикой является коэффициент Зеебека S . Эффект Пельтье представляет собой обратное явление: при прохождении электрического тока через контакт двух различных проводников на нем выделяется или поглощается тепло. Эффект Томсона описывает выделение или поглощение тепла в однородном проводнике с током при наличии градиента температуры. В работе показана тесная взаимосвязь этих эффектов, выражающаяся через соотношения Томсона ($\Pi = T \cdot S$ и $\tau = T \cdot dS/dT$). Особое внимание уделено особенностям переноса тепла в наноструктурах, где начинают доминировать такие явления, как баллистическая теплопроводность, контактное тепловое сопротивление и

рассеяние фононов на границах нанобъектов. Это приводит к значительному снижению теплопроводности, что является критически важным для повышения эффективности термоэлектрических преобразователей.

Вторая глава посвящена новым способам повышения эффективности термоэлектрического преобразования. Подробно рассмотрен «эффект М. Хусейна», открытый в Университете Колорадо и NIST. Исследователи обнаружили, что выращивание наностолбцов нитрида галлия на тонкой кремниевой мембране приводит к резкому замедлению теплопереноса в кремнии без ухудшения его электрической проводимости. Экспериментально продемонстрировано снижение теплопроводности кремния примерно на 21% при неизменных значениях электропроводности и коэффициента Зеебека. Физический механизм эффекта связывается с фононами: стоячие волны, возникающие в наностолбцах GaN, резонируют с волнами фононов в кремнии, заставляя их колебаться в противофазе, что приводит к гашению колебаний и снижению теплопроводности. Это явление представляет собой важный шаг в решении основной проблемы термоэлектриков — декоплинга (разделения) теплового и электрического транспорта. Также в разделе приведен обзор физико-химических свойств нитрида галлия, которые делают его идеальным кандидатом для создания высокоэффективных и термостойких устройств. Среди них: широкая запрещенная зона (3,4 эВ), высокая теплопроводность и электронная подвижность, а также механическая прочность и устойчивость к внешним воздействиям.

На первом этапе была создана модель наностолбца GaN, представляющего собой фрагмент кристаллической решетки нитрида галлия с характерной тетраэдрической координацией атомов.

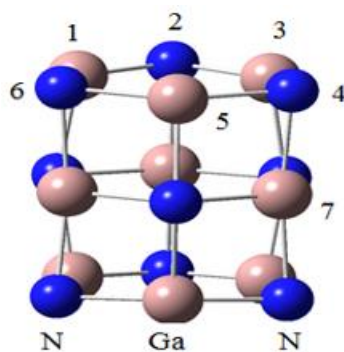


Рисунок 1 - Структура столбца нитрида галлия

- Длина связей Ga–N составила $\sim 1.92\text{--}2.00 \text{ \AA}$.
- Углы между связями в пределах $102.8^\circ\text{--}137.2^\circ$.

В рамках моделирования был построен фрагмент поверхности кремния, представляющий собой модель кремниевого кольца с насыщением водородом по краям (для моделирования граничных условий). Такая модель имитирует поверхность кристаллической решётки Si с достаточной точностью в условиях квантово-химического расчёта.

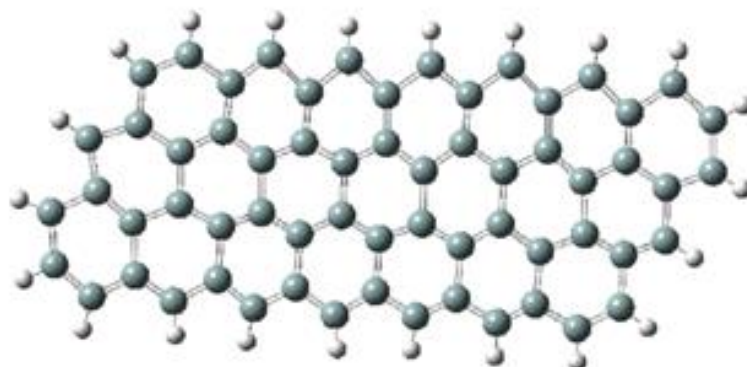


Рисунок 2 – Модель кремниевой подложки

- Длина связи Si–Si $\approx 2.33 \text{ \AA}$ — соответствует стандартной длине ковалентной связи в кристалле кремния.
- Углы $\angle\text{Si–Si–Si}$ близки к 120° — характерны для кольцевых структур, особенно при моделировании упрощённого фрагмента поверхности.

На завершающем этапе работы была создана модель композита, состоящего из наностолбца нитрида галлия и фрагмента кремниевой подложки.

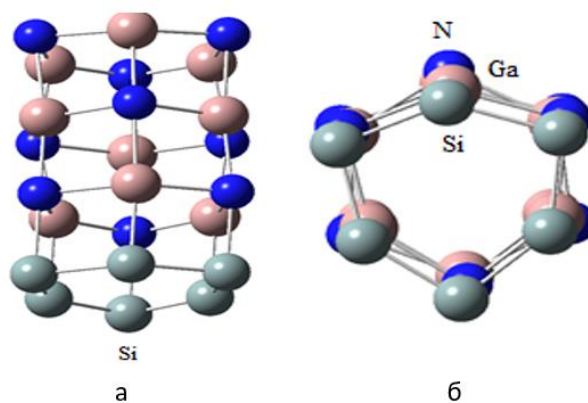


Рисунок 3 - Фрагмент столбца нитрида галлия, выращенного на кремниевом листе (а – вид сбоку; б – вид снизу)

Также были определены структуры нескольких столбиков, которые приведены ниже. Смоделированные структуры состоят из нескольких столбцов на кремневой подложке – четырех и восьми (вид сбоку и сверху).

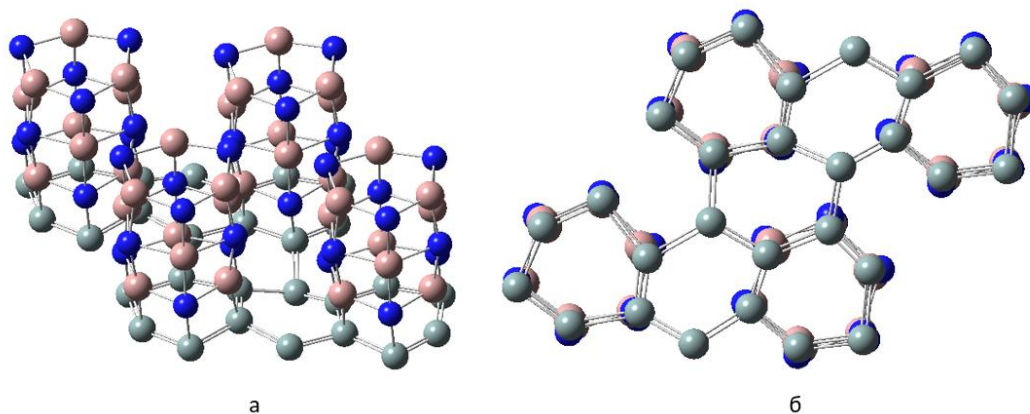


Рисунок 4 - Структура из 4 столбцов нитрида галлия на кремниевой подложке: а) вид сбоку; б) вид снизу

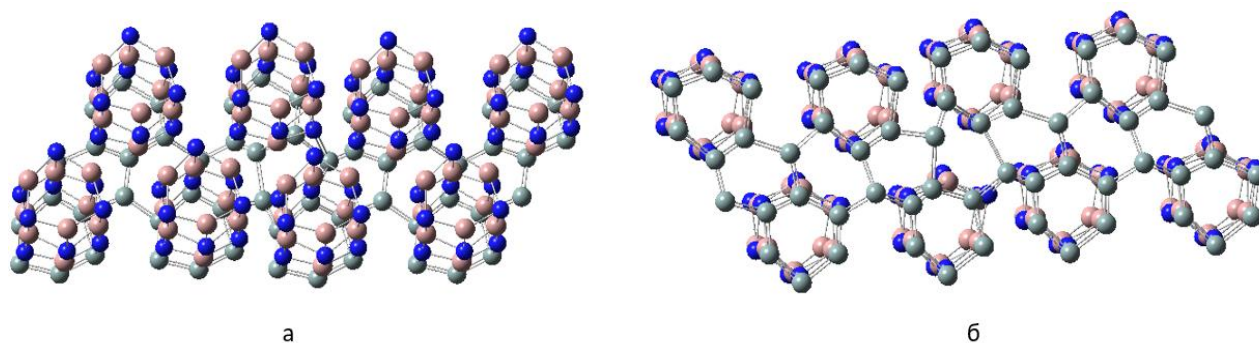


Рисунок 5 - Структура из 8 столбцов нитрида галлия на кремниевой подложке: а) вид сверху; б) вид снизу

Для определения структуры колец кремния, был выделен один из фрагментов.

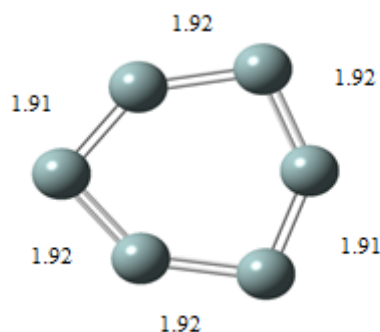


Рисунок 6 - Молекулярный фрагмент кремниевой подложки после расположения на ней столбцов, длины связей приведены в Å

Таблица 1 – Расчет энергии для каждого $n=1,2,3,4$:

Главное квантовое число « n »	Энергия, эВ			
	столбец GaN		кремниевая ячейка	
	$a=1.92 \text{ \AA}$	$a=2.00 \text{ \AA}$	$a=1.91 \text{ \AA}$	$a=1.92 \text{ \AA}$
1	0.000200	0.000442	0.000202	0.000200
2	0.000798	0.00177	0.000808	0.000798
3	0.00180	0.00398	0.00182	0.00180
4	0.00319	0.00707	0.00323	0.00319

Таким образом, моделирование энергетических уровней кремниевой ячейки и столбцов нитрида галлия в виде потенциальной ямы показало, что значения энергии могут совпадать, если в качестве ширины потенциальной ямы взять одну из сторон обеих моделей, равную 1.92 \AA . Это значит, что в столбиках возникают стоячие волны, которые резонируют с волнами фононов в кремнии. В результате чего фононы в кремниевой мембране могут частично колебаться в противофазе с фононами в наностолбиках GaN, то есть волны накладываются так, что колебания кремния гаснут. Это затухание волн в Si приводит к сильному снижению теплопроводности кремния («охлаждению» мембраны), тогда как высокая подвижность электронов в GaN и Si практически не нарушается. Таким образом, достигается разделение (декуплирование) теплового и электрического транспортов – основная

проблема традиционных термоэлектриков. Этот эффект уникален: до сих пор ни в одном материале не наблюдалось подобного резкого снижения теплопроводности без потери электрической проводимости.

Заключение. Проведённое исследование подтвердило, что при контакте наноструктур нитрида галлия с кремниевой подложкой возникает новая химически активная граница, на которой формируются прочные ковалентные связи между атомами кремния и атомами галлия и азота. Это важный результат, поскольку он демонстрирует возможность создания устойчивых нанокompозитов GaN/Si с высокой степенью структурной совместимости. Колебательные спектры, рассчитанные методами квантовой химии, позволили выявить характерные моды $\nu(\text{Si-Ga})$ и $\nu(\text{Si-N})$, отсутствующие в спектрах отдельных компонентов. Их появление однозначно указывает на химическую природу взаимодействия. Таким образом, была достигнута основная цель настоящей работы — установление механизма взаимодействия между наноструктурами GaN и кремниевой подложкой.

Особое значение полученные результаты приобретают в контексте современных исследований, направленных на создание высокоэффективных термоэлектрических материалов. Описанный в работе NIST эффект, заключающийся в снижении теплопроводности кремния за счёт взаимодействия с GaN, получил здесь важное теоретическое подтверждение. В то время как экспериментаторы зафиксировали ослабление теплопереноса, в данной работе предложено **объяснение** этого эффекта через образование новых химических связей, модулирующих колебательный спектр материала. Более того, расчёт спектров показал, что формирование межфазных связей не нарушает исходную симметрию и стабильность структуры GaN, что делает подобные композиты перспективными для применения в силовой электронике и термоэлектрике. Высокая термическая стабильность GaN, в сочетании с возможностью интеграции на кремниевую подложку, открывает

путь к созданию надёжных устройств для преобразования тепловой энергии в электрическую, в том числе на нано- и микромасштабе. В целом, результаты данной работы можно рассматривать как важный шаг в направлении проектирования термоэлектрических гетероструктур нового поколения. Теоретическая демонстрация химической совместимости нитрида галлия и кремния служит прочной основой для дальнейших экспериментальных исследований и разработки прикладных устройств.

Библиографический список

1. Голдсמיד, Х. Джулиан (2017-04-01). Физика термоэлектрического преобразования энергии. Издательство Morgan & Claypool.
2. Prunet, G.; Pawula, F.; Fleury, G.; Cloutet, E.; Robinson, A.J.; Hadziioannou, G.; Pakdel, A. (2021). "A review on conductive polymers and their hybrids for flexible and wearable thermoelectric applications".
3. А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, А.В. Сидоров. Основы физики термоэлектричества. Учебно-методическое пособие. 2018.
4. Bryan T. Spann, Joel C. Weber, Matt D. Brubaker, Todd E. Harvey, Lina Yang, Hossein Honarvar, Chia-Nien Tsai, Andrew C. Treglia, Minhyea Lee, Mahmoud I. Hussein and Kris A. Bertness, Thermal and Electrical Properties Decoupled by Localized Phonon. 23 March 2023, Advanced Materials.
5. Korotkov, A. S. Thermoelectricity: from history to modernity through the CASS activity / A. S. Korotkov, V. V. Loboda // IEEE Circuits and Systems Magazine. – 2021. – V. 21. – Т. 3. – P. 57-65.
6. Goupil, Christophe; Ouerdane, Henni; Zabrocki, Knud; Seifert, Wolfgang; Hinsche, Nicki F.; Müller, Eckhard (2016). "Thermodynamics and thermoelectricity". Continuum Theory and Modeling of Thermoelectric Elements. New York: Wiley-VCH. pp. 2–3.
7. Oersted (1823). "Notiz von neuen electrisch-magnetischen Versuchen des Herrn Seebeck in Berlin" [Notice of new electro-magnetic experiments of Mr. Seebeck in Berlin]. *Annalen der Physik* (in German). **73** (4): 430–432.

8. Joseph R. Sootsman; Duck Young Chung; Mercuri G. Kanatzidis (2009). "New and Old Concepts in Thermoelectric Materials". *Angewandte Chemie*. 48 (46): 8616–8639.

9. Дьяченко Д. Ю., Чернов С. С., научный руководитель канд. техн. наук, доцент Суворин А. В. Исследование эффекта Пельтье и его практическое проведение. Сибирский федеральный университет. Политехнический институт.

10. Хвесьюк В. И. Перенос тепла в наноструктурах. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, вып. 5.

11. Сергеев В.А. Элементы и устройства наноэлектроники. 2016.

12. Спанн, Брайан Т. Вебер, Джоэл С. Брубейкер, Мэтт Д. Харви, Тодд Э. Тепловые и электрические свойства полупроводников, разделенные локализованными фононными резонансами. 2023

13. Анви Н. Сутхар, Дж. Венкатараманая. Традиционные, широкозонные и гибридные преобразователи мощности. 2025

14. Ahmed M. Massoud. An overview of wide and ultra wide bandgap semiconductors for next-generation power electronics applications. 2025

15. Thomas Edwin Beechem, McDonald, Anthony E. Fuller, Elliot James Talin, Albert Alec Rost, Christina M. Size dictated thermal conductivity of GaN. 2016

16. Joachim Piprek. Efficiency Models for GaN-Based Light-Emitting Diodes: Status and Challenges. 2020