Hessisches Kompetenzzentrum
für Hochleistungsrechnen

Thermische Leitfähigkeit in Silizium-Isotopen-Vielfachschichten

Researchers
Michael Bachmann

Principal Investigator
Prof. Dr. Christian Heiliger

Project Term
2015 - 2015

Project Areas
Particles, Nuclei and Fields, Physical and Theoretical Chemistry

Clusters
Skylla Cluster Gießen

Institute
I. Physikalisches Institut

University
Justus Liebig University Giessen

Introduction

Das Element Silizium ist auf der Erde das zweithäufigste Element und daher für die Menschheit nahezu unbegrenzt verfügbar. Silizium ist außerdem ungiftig und umweltfreundlich. Diese Eigenschaften sind neben den physikalischen Eigenschaften der Grund, warum Silizium vielseitige Anwendung in der Industrie findet. Die beiden größten Anwendungen von Silizium gibt es in der Halbleiterindustrie, etwa für Computerchips („Silicon Valley“) oder Photovoltaik. Ein weiteres Gebiet, in dem Silizium eingesetzt werden könnte, ist die Thermoelektrik. In der Thermoelektrik beschäftigt man sich mit dem Bau von thermoelektrischen Generatoren, welche aus Wärme elektrische Energie gewinnen können. Eingesetzt werden thermoelektrische Generatoren unter anderem in Satelliten oder in Kraftfahrzeugen, wo sie als Energiequelle dienen oder den Treibstoffverbrauch senken können. Heutzutage werden für thermoelektrische Generatoren hauptsächlich giftige und umweltschädliche Materialen verwendet. Silizium könnte diese Materialien ersetzen, wenn man die thermische Leitfähigkeit von Silizium reduziert.[1]

Methods

Ein möglicher Ansatz zur Senkung der thermischen Leitfähigkeit ist die Verwendung von nanostrukturierten Silizium-Isotopen-Vielfachschichten. Diese Vielfachschichten bestehen aus aufeinanderfolgenden Schichten aus verschiedenen Silizium-Isotopen. Die Leitfähigkeit wird reduziert durch eine erhöhte Streuung von Gitterschwingungen an den Grenzen dieser Schichten. In diesem Forschungsprojekt wird die Streuung von

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

Gitterschwingungen an diesen Grenzflächen berechnet und quantitativ der Effekt auf die thermische Leitfähigkeit untersucht. Zur Berechnung der Streuung von Gitterschwingungen wurde ein atomares Modell entwickelt, welches auf sogenannten Greensche Funktionen basiert. Es wurden unterschiedliche Schichtanordnungen untersucht: eine periodische Anordnung, in welcher alle Schichten gleich dick sind, sowie mehrere zufällig Anordnungen, in welchen die Schichtdicken zufällig verteilt sind.

Results

Es zeigt sich, dass die periodische Anordnung ein vollkommen anderes Verhalten der thermischen Leitfähigkeit zeigt, als die zufälligen Anordnungen. Erhöht man die Anzahl der Schichten in der zufälligen Anordnung, so sinkt die thermische Leitfä- higkeit wie erwartet. Bei der periodischen Anordnung hingegen stellt sich nach wenigen Schichten einen Sättigungseffekt ein, was bedeutet, dass eine Erhöhung der Schichtanzahl keinen weiteren Effekt auf die thermische Leitfähigkeit hat. Weiterhin wurde untersucht, wie stabil das Verhalten der periodischen Anordnung gegen kleine Störungen ist. Es konnte gezeigt werden, dass selbst kleinste Änderungen an der periodischen Anordnung das periodische Verhalten zerstören.

Discussion

Die Ergebnisse dieses Forschungsprojektes sind nicht nur wichtig für thermoelektrische Materialien, sondern auch generell wichtig für das Verständnis von thermischer Leitfähigkeit von nanostrukturierten Materialien. Dieses Forschungsprojekt wurde im Rahmen des Schwerpunktprogramms SPP1386 „nanostrukturierte Thermoelektrika“ durchgeführt.

Reference

[1] Hochbaum, A., Chen, R., Delgado, R. et al. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires. Nature 451, 163–167 (2008). https://doi.org/10.1038/nature06381

Last Update: 2022-07-07 15:58