SPP 1386 Nanostrukturierte Thermoelektrika - Wärmetransport in Silizium auf der Nanoskala



Researchers
Michael Bachmann and M. Giar

Principal Investigator
Prof. Dr. Christian Heiliger

Project Term
2015 - 2015

Project Areas
Theoretical Condensed Matter Physics

Clusters
Skylla Cluster Gießen

Institute
I. Physikalisches Institut der JLU Gießen

University
Justus Liebig University Giessen

Introduction

Ein limitierender Faktor für die weitere Miniaturisierung elektronischer Halbleiterbauelemente auf der Nanoskala ist die starke lokale Wärmeentwicklung unter Betriebsbedingungen und verminderter Wärmetransport durch komplexe Geometrien der Bauteile. Vor diesem Hintergrund ist ein grundlegendes Verständnis der dem Wärmetransport zugrunde liegenden Prozesse unbedingt notwendig.

Methods

Ein Ansatz hierfür gelingt über eine quantenmechanische Betrachtung der Wärmetransportprozesse auf einer atomaren Größenskala. Wärmetransportprozesse auf dieser Größenskala werden durch Schwingungen der Atome des Festkörpers um ihre Gleichgewichtslage – Phononen – bestimmt. Insbesondere ist hier die computergestützte Umsetzung eines solchen Wärmetransportmodells hilfreich.

Da Silizium nach wie vor das gängige Element für die Entwicklung von Halbleiterbauelementen darstellt – insbesondere auf dem Feld der Computerchips – haben wir uns in unseren Betrachtungen auf dieses Element beschränkt. Die in diesem Projekt angestellten Untersuchungen fallen auch in den

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

Rahmen des Schwerpunktprogrammes SPP 1386 Nanostrukturierte Thermoelektrika der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

Zur Umsetzung des Wärmetransportmodells ist die Berechnung einiger Daten vorab notwendig. Hauptbestandteil des Modells sind anharmonische Kraftkonstanten, welche für Silizium berechnet werden. Die anharmonischen Kraftkonstanten beschreiben die Wechselwirkung der Phononen untereinander. Für die Berechnung derselben greifen wir auf quantenmechanische ab-initio Methoden zurück, welche ohne experimentelle Werte zur Berechnung physikalischer Größen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie (DFT) auskommen.

In diesem konkreten Fall sind die Daten für Silizium mit dem Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) gewonnen worden, einem kommerziellen Softwarepakt, welches maßgebend auf dem Gebiet der computerbasierten Umsetzung von ab-initio Methoden ist. Die anharmonischen Kraftkonstanten sind u.a. wichtig für die Berechnung von Lebensdauern der atomaren Schwingungszustände im Festkörper. Als Test für die für Silizium berechneten Daten haben wir diese Lebensdauern berechnet und gute Übereinstimmung mit in der Literatur vorhandenen Daten erhalten.

Die zugrunde liegende Methodik für die Berechnung der anharmonischen Kraftkonstanten und die damit erhaltenen Ergebnisse wurden auf der Jahrestagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) der Sektion Kondensierte Materie im Frühjahr 2013 in Regensburg präsentiert. Im Rahmen des SPP 1386 Schwerpunktprogrammes sollen die entwickelten Methoden verfeinert und insbesondere in Bezug auf die Berechnung der Wärmetransporteigenschaften von komplizierten Halbleiterbauelementen auf Silizium-Basis ausgebaut werden. Die theoretische Betrachtung des Wärmetransportes auf der Nanoskala basiert auf der Methode der Nichtgleichgewichts-Greenschen-Funktionen, einer Theorie, welche in ihrer computergestützten Umsetzung sehr komplex ist und daher bis dato eher selten Anwendung gefunden hat.

Results

Wir haben eine Umsetzung dieser Methode in einer Dimension entwickelt und die damit erhaltenen Ergebnisse auf dem Doktoranden Workshop des SPP 1386 Schwerpunktprogrammes 2013 in Heidelberg präsentiert. Bereits innerhalb eines vereinfachten Modells in einer Dimension lassen sich bereits qualitativ Ergebnisse erhalten, welche auch im allgemeinen, dreidimensionalen Fall zu erwarten sind. Ziel ist es, in Zukunft die bisher entwickelte Methodik für den eindimensionalen Fall auf den drei Dimensionen zu erweitern. Für den wechselwirkungsfreien Fall verfügen wir bereits über eine Software.[1]

Discussion

Hierbei ist es insbesondere von Bedeutung, den wesentlich komplizierteren dreidimensional Fall rechnerisch effizient umzusetzen, was nur unter geschickter Verwendung hochparalleler Hochleistungsrechner geschehen kann. Besonders wichtig ist daher die Einbettung des Wärmetransportformalismus in einen parallelen Algorithmus, welcher auf einem Hochleistungsrechner gut umsetzbar ist.

Reference

1. M. Bachmann, M. Czerner, S. Edalati-Boostan, and C. Heiliger: Ab initio calculations of phonon transport in ZnO and ZnS. European Physical Journal B 85, 146, 2012 https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-20503-y

Last Update: 2022-06-30 23:08