

**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA**

Cu titlu de manuscris  
C.Z.U.: 539.21

**NICA DENIS**

**INGINERIA FONONICĂ ÎN STRUCTURILE  
NANODIMENSIONALE**

**131.04 – FIZICA COMPUTAȚIONALĂ ȘI MODELAREA PROCESELOR**

Referatul științific  
al tezei de doctor habilitat în științe fizice în baza lucrărilor publicate

**CHIȘINĂU, 2016**

Teza a fost elaborată în Laboratorul de Cercetări Științifice „Fizica și ingineria nanomaterialelor E. Pokatilov” al Universității de Stat din Moldova.

**Consultant științific:**

BALANDIN Alexander PhD, profesor, Universitatea din California – Riverside, SUA.

**Referenți oficiali:**

CASIAN Anatolie doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea Tehnică a Moldovei;

BELOUSOV Igor doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei;

KHITUN Alexander PhD, profesor, Universitatea din California – Riverside, SUA.

**Componența Consiliului științific specializat:**

HADJI Piotr *Președinte*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei;

TRONCIU Vasile *Secretar științific*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, Universitatea Tehnică a Moldovei;

CANȚER Valeriu doctor habilitat în științe fizico-matematice, academician al Academiei de Științe a Moldovei, profesor universitar, Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D. Ghițu” al Academiei de Științe a Moldovei;

PALADI Florentin doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, Universitatea de Stat din Moldova;

MACOVEI Mihai doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe a Moldovei;

BARSUC Alexandru doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea de Stat din Moldova;


NICOLAEVA Albina doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D. Ghițu” al Academiei de Științe a Moldovei.

Susținerea va avea loc la 20 Mai, 2016 ora 16:00 în ședința Consiliului științific specializat DH 30.131.04-02 din cadrul Universității de Stat din Moldova (str. A. Mateevici 60, bl. 4, aud. 222, Chișinău, MD-2009, Moldova).


Referatul științific poate fi consultat la biblioteca Universității de Stat din Moldova (str. A. Mateevici 60, Chișinău, MD-2009, Moldova) și la pagina web a C.N.A.A. ([www.cnaa.md](http://www.cnaa.md)).

Referatul științific a fost expediat la 15.04.2016.


Secretar științific al Consiliului științific specializat DH 30.131.04-02,  
TRONCIU Vasile, doctor habilitat, conferențiar universitar

  
semnătura

Consultant științific,  
BALANDIN Alexander, PhD, profesor

  
semnătura

Autor,  
NICA Denis

  
semnătura

## CUPRINS

<b>ADNOTARE (ROMÂNĂ, ENGLEZĂ, RUSĂ).....</b>	<b>5</b>
<b>LISTA ABREVIERILOR.....</b>	<b>8</b>
<b>INTRODUCERE .....</b>	<b>9</b>
<b>1. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURI.....</b>	<b>13</b>
1.1. Fononii și transportul termic în nanostructurile semiconductoare. ....	13
1.2. Fononii și transportul termic în materialele pe bază de grafen.....	15
1.3. Concluzii la Capitolul 1 .....	23
<b>2. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURILE BIDIMENSIONALE SEMICONDUCTOARE .....</b>	<b>25</b>
2.1. Ingineria spectrului energetic și a vitezelor de grup ale fononilor în nanostructurile semiconductoare bidimensionale.....	25
2.1.1. Modelul continuu pentru fononi în nanostructurile 2D .....	25
2.1.2. Modelele dinamice ale oscilațiilor rețelei cristaline în nanostructurile 2D cu rețea cristalină de tipul „diamant” .....	29
2.2. Ingineria fononică a conductibilității termice în structurile multistratificate cu canal interior din siliciu .....	33
2.3. Ingineria fononică a mobilității electronilor în nanostructurile 2D cu canal conductibil din Si și GaN .....	37
2.4. Concluzii la Capitolul 2 .....	40
<b>3. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURILE SEMICONDUCTOARE UNIDIMENSIONALE .....</b>	<b>41</b>
3.1. Ingineria spectrului energetic și vitezele de grup ale fononilor în nanofirele din GaN și Si, acoperite cu înveliș .....	41
3.1.1. Abordarea continuă pentru fononi în nanofirele dreptunghiulare și cilindrice pe bază de GaN.....	41
3.1.2. Modelele dinamice ale oscilațiilor rețelei pentru nanofirele cu celulă elementară de tipul „diamant” .....	44
3.2. Ingineria fononică a conductibilității termice în nanofirele pe bază de siliciu.....	47
3.3. Concluzii la Capitolul 3 .....	50

<b>4. INGINERIA FONONICĂ ÎN GRAFEN .....</b>	<b>51</b>
4.1. Fononii în grafen .....	51
4.2. Conductibilitatea termică de rețea a grafenului .....	55
4.3. Conductibilitatea termică fononică în fâșiile de grafen.....	61
4.4. Concluzii la Capitolul 4.....	64
<b>CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI .....</b>	<b>65</b>
<b>BIBLIOGRAFIE .....</b>	<b>67</b>
<b>DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII .....</b>	<b>79</b>
<b>CURRICULUM VITAE .....</b>	<b>80</b>

## ADNOTARE (ROMÂNĂ, ENGLEZĂ, RUSĂ)

Nica Denis, „*Ingineria fononică în structurile nanodimensionale*”, referatul științific al tezei de doctor habilitat în științe fizice (prezentată în baza lucrărilor științifice publicate), Chișinău, 2016. Introducere, 4 Capitoare, Concluzii generale și recomandări, 176 titluri bibliografice, 89 pagini, 25 figuri, 2 tabele. În baza rezultatelor obținute au fost publicate 150 lucrări științifice, inclusiv o monografie, 2 capitole în monografii, 6 articole de sinteză și 33 articole în revistele cotate de *ISI Web of Science*, 12 articole în revistele științifice naționale și peste 100 teze la conferințele internaționale și naționale.

*Cuvinte-cheie:* fononi, electroni, transport termic, nanostructuri semiconductoare, nanostrat, nanofir, grafen, inginerie fononică, abordare continuă, dinamica rețelei cristaline.

**Domeniul cercetărilor:** fizica nanosistemelor.

**Scopul și obiectivele:** dezvoltarea teoretică a conceptului ingineriei fononice în nanostructurile semiconductoare multistrat uni- și bidimensionale și în grafen pentru îmbunătățirea conductibilității termice și electrice a lor.

**Noutatea științifică și originalitatea:** în lucrare este dezvoltată concepția de inginerie fononică în nanostructurile semiconductoare și în grafen, care reprezintă o metodă principial nouă de îmbunătățire a proprietăților termoconductibile și electroconductibile ale nanostructurilor prin dirijarea direcționată a proprietăților fononice ale lor; în cadrul diferitor modele ale oscilațiilor rețelei cristaline au fost cercetate detaliat stările fononice în nanostructurile studiate; a fost dezvoltată teoria transportului de căldură, care explică valorile înalte ale conductibilității termice de rețea a grafenului, cât și dependența puternică a ei de *dimensiunile spațiale ale stratului, de concentrația defectelor rețelei cristaline și de calitatea frontierelor stratului*.

**Importanța teoretică:** au fost elaborate modele teoretice exacte ale transportului fononic în nanostructurile semiconductoare multistrat și în grafen; au fost cercetate teoretic și explicate particularitățile proceselor fononice în astfel de structuri.

**Importanța aplicativă** a rezultatelor obținute este legată de posibilitatea îmbunătățirii caracteristicilor de lucru ale dispozitivelor electronice moderne prin modificarea proprietăților fononice ale lor.

## SUMMARY

Nica Denis, „Phonon engineering in nanodimensional structures ”, scientific review of the doctor habilitat thesis in physics (based on published articles), Chisinau, 2016. Introduction, 4 Chapters, General conclusions and recommendations, 176 References, 89 Pages, 25 figures, 2 Tables. Based on the obtained resultsf, 150 scientific works were published, including 1 monograph, 2 books chapters, 6 review papers and 33 research articles in ISI journals, 12 articles in national scientific journals and over 100 abstracts in proceedings/books of abstracts of international or national conferences.

*Keywords:* phonons, electrons, thermal transport, semiconductor nanostructures, nanofilm, nanowire, graphene, phonon engineering, continuum approach, crystal lattice dynamics.

**Domain of study:** physics of nanosystems.

**Goal and objectives:** theoretical development of phonon engineering concept for one- and two-dimensional multilayered semiconductor nanostructures and graphene for improvement of their electrical and thermal conductivities.

**Scientific novelty and originality:** the theoretically developed phonon engineering concept for multilayered semiconductor nanostructures and graphene *is fundamentally new approach* for improvement of thermal and electrical properties of nanostructures by a proper tuning of their phonon properties; the phonon states in considered nanostructures are investigated in detail, using different models of crystal lattice vibrations; the developed theory of heat transport allows interpretation of extremely high values of phonon thermal conductivity in graphene and its strong dependence on spatial dimensions of graphene flakes, concentration of crystal lattice defects and edge roughness.

**Theoretical importance:** accurate models of phonon transport in multilayered semiconductor nanostructures and graphene are developed; the peculiarities of phonon processes in such nanostructures are theoretically investigated and explained.

**Practical significance** of the obtained results is related to a possible improvement of operational parameters of modern nanostructure-based devices by proper tuning of their phonon properties.

## АННОТАЦИЯ

Ника Денис, „Фононная инженерия в наноразмерных структурах”, научный реферат диссертации на соискание ученой степени доктора хабилитат физических наук (на основе опубликованных научных работ), Кишинев, 2016. Введение, 4 Главы, Общие выводы и рекомендации, 176 Ссылок, 89 Страниц, 25 Рисунков, 2 Таблицы. На основе полученных результатов опубликовано 150 научных работ, включая монографию, 2 главы в монографии, 6 обзорных и 33 исследовательские статьи в международных журналах, индексируемых *ISI Web of Science*, 12 статей в национальных научных журналах и более 100 тезисов на международных и национальных конференциях.

*Ключевые слова:* фононы, электроны, тепловой транспорт, полупроводниковые наноструктуры, нанослой, нанонить, графен, фононная инженерия, континуальный подход, динамика кристаллической решетки.

**Область исследований:** физика наносистем.

**Цель и задачи:** теоретическое развитие концепции фононной инженерии в одно- и двумерных многослойных полупроводниковых наноструктурах и графене для улучшения их теплопроводящих и электропроводящих свойств.

**Научная новизна и оригинальность:** в работе развита концепция фононной инженерии в многослойных полупроводниковых наноструктурах и графене, которая представляет собой принципиально новый метод улучшения теплопроводящих и электропроводящих свойств наноструктур путем целенаправленного управления их фононными свойствами; в рамках различных моделей колебаний кристаллической решетки детально исследованы фононные состояния в рассматриваемых наноструктурах; развита теория теплового транспорта, которая объясняет как высокие значения решеточной теплопроводности графена, так и ее сильную зависимость от пространственных размеров слоя, концентрации дефектов кристаллической решетки и качества границ слоя.

**Теоретическая значимость:** разработаны точные модели фононного транспорта в многослойных полупроводниковых наноструктурах и графене; теоретически исследованы и объяснены особенности фононных процессов в таких структурах.

**Прикладная ценность** полученных результатов связана с возможным улучшением рабочих характеристик современных электронных устройств путем изменения их фононных свойств.

## LISTA ABREVIERILOR

TC	– temperature camerei
1D	– unidimensional
2D	– bidimensional
3D	– tridimensional
NFG	– nanofâșie de grafen
Modelul „BvK”	– modelul „Born-von Karman”
Modelul „VFF”	– modelul „Valence Force Field”
Modelul „FCC”	– modelul „Face-centered cubic cell”
ETB	– ecuația de transport Boltzmann
CI	– constantele de interacțiune interatomice
GM ori SLG	– grafen monostrat
SEL	– suprafețe exterioare libere
SEF	– suprafețe exterioare fixe
NF	– nanofir
NS	– nanofirul segmentat
NSTV ori MSNW	– nanofir cu secțiunea transversală variabilă
$v$	– viteza medie de grup a fononilor
$\hbar$	– constanta Plank
$k_B$	– constanta Boltzmann
$T$	– temperatura absolută



## INTRODUCERE

Relevanța și importanța subiectului Tezei. Fononii se manifestă în toate procesele fizice de bază, care se desfășoară în semiconductori: ei transportă căldura, limitează mobilitatea electronilor, influențează proprietățile optice și transmit sunetul. Micșorarea dimensiunilor dispozitivelor electronice în domeniul lungimilor mai mici decât lungimea parcursului liber mediu al fononului acustic creează o situație nouă pentru interacțiunea și propagarea fononilor. Pe de o parte, aceasta poate face mai dificilă evacuarea căldurii de la dispozitivele electronice datorită micșorării vitezei de grup a fononilor. Pe de altă parte, acest lucru deschide posibilități noi pentru ingineria spectrului energetic al fononilor în nanomateriale. Ingineria fononică reprezintă o influență deliberată asupra proprietăților fononice ale materialului în scopul îmbunătățirii proprietăților electronice și termice ale lui. Această abordare se deosebește fundamental de metodele obișnuite de evacuare a căldurii, utilizate în electronică (montarea consecutivă a straturilor de evacuare a căldurii) și de ingineria benzilor electronice interzise. Aplicarea practică a ingineriei fononice poate duce la apariția unei clase noi de materiale nanostructurate și a dispozitivelor cu proprietăți fononice îmbunătățite, care, la rândul său, vor contribui la dezvoltarea continuă a micro- și nanoelectronicii.

Scopurile acestei Teze sunt:

- Dezvoltarea teoretică a conceptului ingineriei fononice pentru nanostructurile cvazi-unidimensionale și bidimensionale multistratificate din semiconductori și grafen;
- Demonstrarea posibilității de îmbunătățire a conductibilităților electrice și termice a acestor nanostructuri prin ingineria stărilor fononice ale lor.

Pentru atingerea acestor scopuri, au fost formulate următoarele obiective:

- Dezvoltarea modelelor teoretice ale fononilor și a transportului de căldură în structurile semiconductoare și în grafen;
- Cercetarea proprietăților electronice și a interacțiunii electron-fononice în nanostructurile semiconductoare multistratificate plane;
- Cercetarea mecanismelor împrăștierii fononice în nanostructurile semiconductoare multistrat și în grafen;
- Optimizarea dimensiunilor și formei nanostructurilor pentru realizarea unui transport de căldură optimal și majorarea mobilității electronilor.

Pentru realizarea obiectivelor propuse au fost utilizate următoarele metode și modele teoretice:

- Abordarea continuă și modelele dinamice ale oscilațiilor rețelei cristaline pentru fononi;
- Aproximația masei efective pentru electroni;

- Ecuația cinetică Boltzmann în aproximarea perioadei de relaxare la modelarea proprietăților termice și electroconductibile ale nanostructurilor cercetate;
- Metoda diferențelor finite la soluționarea numerică a sistemului de ecuații diferențiale; metoda descompunerii QR pentru soluționarea numerică a problemei privind valorile proprii și vectorii proprii; metoda dreptunghiurilor la integrarea numerică.

*Importanța teoretică și noutatea științifică a rezultatelor este oglindită în următoarele:*

- Au fost dezvoltate și utilizate abordarea continuă și trei modele dinamice ale oscilațiilor rețelei cristaline: „Face-centered cubic cell (FCC)”, „Born-von Karman (BvK)” și „Valence force field (VFF)” pentru cercetarea proprietăților fononice ale nanostructurilor semiconductoare multistratificate și a grafenului;
- A fost demonstrată teoretic posibilitatea de dirijare a conductibilității termice și conductibilității electrice ale nanostructurilor semiconductoare și a grafenului prin ingineria proprietăților fononice ale lor;
- A fost dezvoltat modelul teoretic al transportului de căldură în grafen, în grafenul multistrat, grafenul „twisted” și în grafită, care a fost utilizat la cercetarea transportului de căldură în aceste materiale;
- Au fost interpretate teoretic atât valorile extrem de înalte ale conductibilității termice a materialelor în bază de grafen, cât și dependența puternică a conductibilității termice de dimensiunile spațiale, grosimea, forma și rugozitatea straturilor de grafen, a defectelor punctiforme și a izotopilor.

*Conceptul de inginerie fononică în structurile nanodimensionale, care a fost elaborat teoretic, prezintă o abordare fundamental nouă de îmbunătățire a conductibilităților termice și electrice a nanostructurilor semiconductoare și a grafenului.*

*Valoarea teoretică a rezultatelor constă în elaborarea modelelor exacte pentru fononi și transportul de căldură în nanostructurile multistrat și în grafen; în cercetarea particularităților proceselor fononice în nanostructuri și în demonstrarea posibilității de îmbunătățire a proprietăților termice și electroconductibile ale structurilor semiconductoare multistrat și a grafenului prin metodele ingineriei fononice.*

*Valoarea aplicativă a rezultatelor este legată de posibilele îmbunătățiri a caracteristicilor de lucru a dispozitivelor electronice moderne în bază de nanostructuri prin influențarea corespunzătoare a proprietăților fononice ale lor.*

Rezultate științifice principale înaintate spre susținere:

1. Spectrele energetice ale fononilor și vitezele de grup ale fononilor în nanostructurile semiconductoare plane și în nanofire pot fi modificate esențial prin alegerea corespunzătoare a grosimii și materialului straturilor de înveliș.
2. Straturile de înveliș cu o viteză a sunetului mai înaltă (mai joasă) decât în stratul interior, majorează (micșorează) viteza medie de grup a fononilor și conductibilitatea termică de rețea.
3. În nanostructurile plane multistrat și în nanofirele cu înveliș apar tipuri noi de mode fononice: modele (i) „core-like”, la care oscilația atomilor are loc în temei doar în stratul interior; (ii) modele „cladding-like”, la care oscilația atomilor se desfășoară în temei doar în straturile de înveliș și (iii) modele „propagating”, la care oscilațiile atomilor au loc atât în stratul interior, cât și în înveliș.
4. Mobilitatea electronilor în heterostructura AlN/GaN/AlN de tip „wurtzite” poate fi majorată de 2 – 5 ori la temperatura camerei prin compensarea câmpului electric încorporat cu un câmp electric exterior ori prin crearea în centrul gropii potențiale din GaN a nanocanalului din  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  cu o concentrație joasă de In:  $x \sim 0.05$ .
5. Mobilitatea electronilor în nanostraturile din siliciu poate fi majorată prin acoperirea lor cu înveliș, având o viteză a sunetului mai înaltă decât în siliciu.
6. Conductibilitatea termică fononică a nanofirelor semiconductoare și a nanofirelor cu secțiune transversală variabilă sunt cu un ordin mai joase decât în nanofirul omogen cu secțiune constantă datorită filtrării fononice, adică a captării unei părți din modele fononice în segmentele nanofirelor.
7. Conductibilitatea termică „in-plane” a grafenului monostrat depinde puternic de temperatură, anarmonismul rețelei cristaline, concentrația defectelor punctiforme, forma, dimensiunile spațiale și de rugozitatea frontierelor stratului.
8. Conductibilitatea termică „in-plane” a grafenului multistrat se micșorează rapid la majorarea numărului  $n$  al monostraturilor de grafen și devine egală cu conductibilitatea termică a grafitului pirolitic cu orientare înaltă pentru  $n=4$ .
9. Conductibilitatea termică „in-plane” a fâșiilor micrometrice dreptunghiulare din grafen demonstrează o dependență nemonotonă de dimensiunile spațiale ale lor datorită parcursului liber mai mare al fononilor acustici.
10. În grafenul bistrat „twisted” apar modele fononice hibride „folded”, care depind de unghiul de rotație dintre straturi și reprezintă un amestec de mode fononice ale grafenului bistrat cu unghiul de rotație nul.

Aprobarea rezultatelor științifice: au fost prezentate peste 100 rapoarte la conferințe științifice internaționale și naționale, care s-au desfășurat în Statele Unite ale Americii, Rusia, Japonia, Germania, Italia, Belarus, Ucraina, Polonia, Grecia, Turcia și Republica Moldova, inclusiv 5 rapoarte plene invitate și 19 rapoarte orale, care au fost prezentate nemijlocit de autorul Referatului Științific.

Publicații: rezultatele prezentate în Teză sunt sistematizate în 150 lucrări științifice, inclusiv o monografie, 2 capitole în monografii, 6 articole de sinteză și 33 articole științifice în revistele internaționale cotate ISI, 12 articole în revistele științifice naționale și peste 100 teze la conferințele internaționale și naționale.

Structura Referatului Științific: Referatul constă din Introducere, 4 Capitole și Concluzii generale și recomandări. Referatul cuprinde 176 titluri bibliografice, 87 pagini, 25 figuri și 2 tabele.

Cuvinte-cheie: fononi, electroni, transport termic, nanostructuri semiconductoare, nanostrat, nanofir, grafen, inginerie fononică, abordare continuă, dinamica rețelei cristaline.

## 1. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURI

Cuantele de oscilație ale rețelei cristaline – fononii influențează toate procesele fizice din corpurile solide [1-3]. Ei limitează mobilitatea electronului la temperaturi apropiate de temperatura camerei (TC), modifică proprietățile optice ale materialelor cristaline. Fononii acustici sunt principalii transportatori de căldură în izolatori și semiconductori [1]. Fononii cu lungime de undă mare propagă sunetul, de aceea și poartă denumirea de fononi. Fononii se caracterizează prin legea dispersiei  $\omega(\vec{q})$ , unde  $\omega$  este frecvența unghiulară, iar  $\vec{q}$  – vectorul de undă al fononului [1-3]. În semiconductorii volumetrici cu  $g$  atomi în celula elementară, există  $3g$  ramuri fononice de dispersie pentru fiecare  $\vec{q}$  [2]. Trei tipuri de mode fononice, care în limita lungimilor de undă mari descriu oscilația celulei elementare în general, formează trei ramuri de fononi acustici. Celelalte mode fononice descriu mișcarea relativă a atomilor în cadrul celulei elementare și formează  $3(g-1)$  ramuri ale fononilor optici. Ramurile fononice se împart în ramuri fononice longitudinale acustice/optice (LA/LO) și ramuri fononice transversale acustice/optice (TA/TO). În grafen, oscilațiile perpendiculare planului stratului se simbolizează ca  $z$  – oscilații:  $z$ -acustice (ZA) și  $z$ -optice (ZO) [4-6]. În limita lungimilor de undă mari, fononii acustici din cristalele volumetrice posedă o lege a dispersiei liniară  $\omega = v_{sound}q$ , unde  $v_{sound}$  reprezintă viteza sunetului, iar fononii optici sunt practic adispersi și se caracterizează de viteza de grup  $v = d\omega/dq$ , care este aproape nulă.

### 1.1. Fononii și transportul termic în nanostructurile semiconductoare.

Confinamentul spațial al fononilor acustici în nanostructuri duce la modificarea dispersiei și a vitezelor de grup ale fononilor, polarizării lor, densității stărilor fononice [7-10], schimbând interacțiunea fononilor acustici cu alți fononi, cu defectele rețelei cristaline și cu electronii [8-11]. Aceste modificări creează posibilități noi pentru ingineria spectrului fononic în nanostructuri în scopul îmbunătățirii proprietăților termice și electrice ale lor. Parcursul liber mediu al fononului  $\Lambda$  în semiconductori constituie  $\sim 50-300$  nm la temperatura camerei. Lungimea de undă a fononului termic  $\lambda_0 = 1.48 \hbar v_{sound} / (k_B T)$  este de circa 1-2 nm ( $\hbar$  – constanta Plank,  $k_B$  – constanta Boltzmann,  $T$  – temperatura absolută) [10]. De aceea ingineria spectrului fononilor acustici la temperatura camerei este posibilă în materialele nanostructurate.

Spectrul fononic poate fi modificat în modul cel mai eficient în nanostructurile, formate din straturi cu impedanță acustică diferită:  $\zeta = \rho v_{sound}$ , unde  $\rho$  este densitatea materialului [11-15]. În astfel de structuri dispersia fononilor depinde nu doar de dimensiunile spațiale și de condițiile de frontieră la suprafețele exterioare, dar și de materialul straturilor [11-15].

Ingineria fononilor optici în nanostructuri se deosebește de ingineria fononilor acustici. În limita lungimilor de undă mari fononii optici corespund mișcării atomilor în interiorul celulei elementare, de aceea starea lor nu poate fi modificată prin aplicarea frontierelor exterioare suplimentare. Însă poate fi modificată interacțiunea electron-fononică prin alegerea unor astfel de grosimi și de materiale ale nanostructurilor, pentru care diferența între energiile stărilor electronice de confinament să fie apropiată de energia fononilor optici [16]. Acest efect a fost numit drept efectul de „strangulare” și poate fi utilizat la optimizarea dispozitivelor în bază de corpuri solide. În heterostructurile, care sunt formate din straturi, în care energia fononilor optici se deosebește mult, este posibilă localizarea fononilor optici în structurile corespunzătoare [3, 17-18]. Acest efect poate fi de asemenea utilizat în scopuri practice.

Cu toate că ingineria fononică a devenit o direcție de cercetare populară și de perspectivă relativ recent, cercetarea stărilor fononice în materialele stratificate posedă o istorie îndelungată. În anii 1950 se cercetau fononii „folded” în mediile stratificate, care în prezent se numesc suprarețele [19]. Fononii „folded” au fost descoperiți experimental mai târziu în suprarețelele GaAs/AlGaAs [20]. În anii 90 ai secolului XX un număr impunător de cercetări teoretice au fost consacrate împrăștierii electronilor de confinament în peliculele subțiri și în nanofire (NF) [21-24].

Interesul cercetătorilor față de ingineria fononică a sporit mult atunci când s-a arătat, că modificarea spectrului fononic în nanostructuri influențează mult conductibilitatea termică de rețea [7-8]. Micșorarea vitezei medii de grup în nanostructuri și nanofire poate majora împrăștieria fononilor pe defectele punctiforme (vacanțe, impurități, izotopi etc.), dislocări și pe alți fononi [25-29]. Amplificarea împrăștierii fononilor micșorează conductibilitatea termică de rețea în nanostructuri comparativ cu materialele volumetrice [25-29]. Pe de o parte, valorile mici ale conductibilității termice în nanostructuri fac mai dificilă evacuarea căldurii de la nanodispozitivele electronice, pe de altă parte – materialele cu conductibilitate termică joasă și conductibilitate electrică înaltă sunt necesare pentru dispozitivele termoelectrice [7, 30]. Coeficientul termoelectric de calitate „*figure of merit*”  $ZT$  conține conductibilitatea electrică la numărător și conductibilitatea termică – la numitor:  $ZT = S^2\sigma T/(\kappa_{ph} + \kappa_{el})$ , unde  $S$  este coeficientul Seebeck,  $\sigma$  – conductanța electrică și  $T$  – temperatura absolută,  $\kappa_{ph}$  și  $\kappa_{el}$  – conductibilitățile termice fononică și electronică, corespunzător. În lucrările teoretice [31-32] a fost prezisă posibilitatea majorării puternice a lui  $ZT$  în nanostructurile cvazi-unidimensionale (1D) și cuasi-bidimensionale (2D) ca urmare a amplificării conductibilității electrice și a suprimării interacțiunii electron-fononice.

Când dimensiunea structurii  $D$  este comparabilă cu lungimea parcursului liber al fononului, dispersiile fononice sunt de tip volumetric. În acest caz transportul fononilor acustici este determinat, în temei, de împrăștierea pe suprafețele structurii. Perioada de difuzie a fononilor pe suprafață are forma [1]  $1/\tau_B = (V_S/D)[(1-p)/(1+p)]$ , unde  $p$  este parametrul de împrăștiere superficială, care determină probabilitatea împrăștierii de oglindă și de difuzie pe suprafață:  $0 \leq p \leq 1$ . În nanostructurile, în care împrăștierea fononilor pe suprafețe este dominantă, conductibilitatea termică depinde de  $D$  în felul următor:  $\kappa_p \sim c_p v_{sound} \Lambda \sim c_p v_{sound}^2 \tau_B \sim c_p v_{sound} D$ , unde  $c_p$  este capacitatea termică la presiune constantă.

Când dimensiunea structurii  $D$  devine comparabilă cu  $\lambda_0$ , confinamentul spațial al fononilor acustici și cuantificarea modelor fononice începe să influențeze puternic atât transportul de căldură, cât și cel electronic. În acest caz se deschid posibilități noi de majorare ori micșorare a conductibilității termice și conductibilității electrice prin ingineria spectrului fononic.

Mobilitatea electronilor în nanofire, care este limitată de împrăștierea elastică a electronilor pe impuritățile ionizate, poate fi majorată puternic pe contul micșorării spațiului tranzițiilor posibile a electronilor în sistemele cvazi-1D [33]. Însă mobilitatea electronilor la temperatura camerei este limitată de fononi și nu de impurități. Recent a fost demonstrat teoretic faptul, că mobilitatea electronilor, limitată de fononi, poate fi majorată substanțial în nanofirele din siliciu [34] și în straturile din siliciu [35] prin acoperirea lor cu un strat din diamant artificial. Stratul din diamant este rigid din punct de vedere acustic și modifică dispersia fononilor acustici în interiorul canalului din siliciu, suprimă interacțiunea electron-fononică și majorează mobilitatea electronului [34-35]. În mod analogic putem modifica conductibilitatea termică de rețea în nanofire și nanostraturi prin acoperirea lor cu înveliș, având o viteză corespunzătoare a sunetului [36-37]. Este important de a menționa, că prezicerile referitoare la influența fononilor de confinament asupra transportului termic și electronic, făcute în primele lucrări în cadrul aproximației continue [7-9,12-15,25,30,34-43] au fost confirmate prin calcule independente [44], realizate în cadrul dinamicii moleculare și prin măsurări directe în nanofirele Ge/Si [45]. Metodele enunțate ale ingineriei fononice pot fi utilizate în industria electrică la elaborarea nanotranzistorilor și a materialelor cu benzi fononice interzise [38-43]. Posibilitățile ingineriei fononice doar vor crește la micșorarea ulterioară a dimensiunilor tranzistorilor în domeniul valorilor comparabile cu  $\lambda_0$ .

## 1.2. Fononii și transportul termic în materialele pe bază de grafen.

Fononii acustici sunt principalii transportatori ai călduri în materialele carbonice [46]. Cu toate că grafitul demonstrează proprietăți metalice, transportul de căldură în el este determinat de

fononi datorită legăturilor covalente puternice  $sp^2$  dintre atomi. Conductibilitatea termică a materialelor carbonice la temperatura camerei variază într-un diapazon larg de valori de la  $0.01 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  în carbonul amorf până la  $\sim 2000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  în diamant și grafit [46]. Primele măsurări a conductibilității termice în stratul monoatomic de carbon – în grafen, au fost realizate de echipa Prof. A. Balandin de la Universitatea din California – Riverside, SUA în 2007. Aceste măsurări au arătat, că grafenul posedă o valoare – record de înaltă a conductibilității termice:  $\kappa \sim 3000\text{--}5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la temperatura camerei [47-48]. Valorile obținute pentru conductibilitatea termică a peliculelor de grafen având dimensiunile spațiale  $\sim 10 \mu\text{m}$  întrecă conductibilitatea termică a diamantului și conductibilitatea termică „in-plane” a grafitului.

Rezultatele experimentale au fost interpretate teoretic prin specificul transportului fononic 2D [6,49]. Fononii cu energie joasă, care aduc aportul principal în conductibilitatea termică, se caracterizează în grafen printr-un parcurs liber foarte mare [48] ca urmare a împrăștierii slabe pe alți fononi. Acești fononi se împrăștie foarte slab în procesele fonon-fononice anarmonice. Conductibilitatea termică înaltă și densitatea bidimensională a stărilor fononice fac grafenul un material de-a dreptul ideal pentru ingineria fononică.

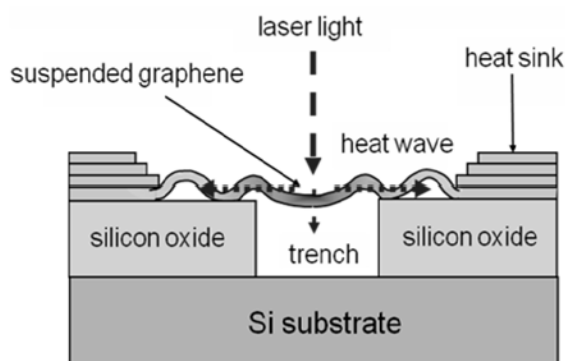


Fig. 1.1. Imaginea schematică a instalației experimentale, în care laserul se focalizează pe stratul de grafen, atârnat pe un suport din siliciu. Lumina absorbită provoacă încălzirea locală a stratului și duce la propagarea undelor termice către extremitățile stratului. Desenul a fost retipărit din [48] cu permisiunea American Institute of Physics.

Primele măsurări ale conductibilității termice a grafenului au fost efectuate utilizând metoda „Raman optothermal” (vezi Figura 1.1). Experimentele s-au efectuat pentru straturile de grafen, obținute prin metoda „mechanical exfoliation” din Kish și grafit pirolitic. S-a stabilit, că conductibilitatea termică variază în limite largi și poate depăși valoarea conductibilității „in-plane” a grafitului de  $\sim 2000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la temperatura camerei [47-48]. De asemenea s-a arătat, că aportul electronilor în conductibilitatea termică la temperaturi apropiate de temperatura



camerei este mult mai mic decât cel al fononilor, adică  $\kappa_e \ll \kappa_{ph}$ , iar lungimea parcursului liber al fononilor la aceste temperaturi este de  $\sim 800$  nm [48].

Măsurările independente ulterioare a conductibilității termice au fost de asemenea efectuate cu ajutorul metodei „Raman optothermal” [50-52]. S-a stabilit, că conductibilitatea termică a grafenului „*suspended*”, obținut prin depunerea din fază gazoasă (CVD) întrece valoarea de  $\sim 2500$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la temperaturi de 350 K și de  $\sim 1400$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la 500 K [50]. Aceste valori de asemenea sunt superioare valorilor conductibilității termice „in-plane” a grafitului volumetric. Alte măsurări ale conductibilității termice au arătat, că conductibilitatea termică a grafenului „*suspended*” este situată în diapazonul de valori cuprins între  $\sim 1500$  și  $\sim 5000$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  [51], iar conductibilitatea membranelor de grafen „*suspended*” este de  $\kappa \approx 630$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  [52]. Dispersia mare în valorile conductibilității termice a grafenului se explică prin condițiile diferite de efectuare a experimentului (atingerea diferitor valori ale temperaturii la tratarea cu radiație laser) și prin tensiunile diferite în rețeaua cristalină a mostrelor cu diferite forme și dimensiuni.

Conductibilitatea grafenului, depus pe substrat („*supported*”) este mult mai joasă din cauza modificării modelor fononică și împrăștierii pe interfață grafen/substrat. Conductibilitatea grafenului pe substratul  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  este  $\kappa \approx 600$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  în apropierea temperaturii camerei [53]. Utilizând rezultatele experimentale obținute pentru grafenul pe substrat, autorii au modelat conductibilitatea grafenului „*suspended*” și au obținut valoarea de  $\sim 3000$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la temperaturi apropiate de temperatura camerei.

Necâtând la dispersia considerabilă a valorilor experimentale privind conductibilitatea termică a grafenului, putem concluziona, că conductibilitatea termică a lui întrece considerabil conductibilitatea termică a materialelor importante ale microelectronicii ca siliciul volumetric ( $\kappa = 145$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la TC) și cuprul volumetric ( $\kappa = 400$   $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la TC). Diferențele în valorile conductibilității termice a grafenului pot fi legate de dimensiunile spațiale și formele diferite ale mostrelor experimentale, de omogenitatea diferită după grosime a stratului de grafen, de diferența în defectele rețelei cristaline și de temperatura diferită a mostrei în momentul efectuării experimentului. O analiză mai detaliată a metodelor experimentale de măsurare a conductibilității termice a grafenului și a erorilor experimentale posibile este prezentată în lucrările experimentale originale [47-48, 50-53] și în sinteza detaliată [46].

Primele cercetări a proprietăților termice a materialelor în bază de grafen [47-48, 50-54] au stimulat interesul față de dezvoltarea modelelor teoretice a fononilor și a transportului de căldură în aceste materiale. În ultimii câțva ani a fost dezvoltat un număr mare de diferite modele pentru descrierea modelor fononice și a transportului de căldură în grafit, grafen și în nanofâșii de grafen (NFG).

Spectrele energetice a fononilor s-au studiat în cadrul aproximației de gradient generalizate Perdew-Burke-Ernzerhof [4-5, 55], a diferitor modele de oscilații a rețelei cristaline: Valence-force-field și Born-von Karman [6, 49, 56-60], a abordării continue [61-63], aproximării de ordinul unu a funcției locale de densitate [63-64], a modelelor constantelor de forță a patru ori cinci cele mai apropiate sfere de coordinație [4, 65]. La calcularea dispersiilor fononice s-au utilizat de asemenea modelele, bazate pe potențialele de model a interacțiunilor interatomare Tersoff, Brenner ori Lennard-Jones [66-68]. Conductibilitatea termică s-a studiat în cadrul abordărilor dinamicii moleculare [69-85], a teoriei funcției de densitate [86-87], metodei funcțiilor Green [88-89] și a ecuației cinetice Boltzmann [6, 49, 56-57, 66-68, 90-94]. S-a stabilit faptul, că dispersiile fononice depind puternic de constantele interacțiunii interatomare – a parametrilor de ajustare în majoritatea modelelor. De aceea alegerea corectă a lor este necesară pentru descrierea exactă a energiei fononilor și a conductibilității termice în grafen, în grafenul „*twisted*” și în nanofâșii de grafen [29, 58, 95].

Toate modelele teoretice denotă o dependență puternică a conductibilității termice de rețea a grafenului de parametrii stratului de grafen: rugozitatea frontierelor, grosimea grafenului multistrat, dimensiunile spațiale și forma stratului, distribuția tensiunilor rețelei cristaline, concentrația izotopilor, impurităților și a granulelor. Valorile conductibilității termice, obținute în cadrul dinamicii moleculare, sunt de obicei mai mici decât valorile experimentale și valorile obținute în cadrul ecuației Boltzmann. Acest lucru este legat de excluderea fononilor cu lungime de undă mare din transportul de căldură în cadrul dinamicii moleculare ca urmare a dimensiunii finite a domeniului cercetat [95].

Efectul de influențare a rugozității frontierelor asupra conductibilității termice a grafenului și a nanofâșiilor de grafen s-a cercetat în [6, 49, 54, 61, 69, 81, 93, 96-97]. Rugozitatea puternică a frontierelor poate să micșoreze cu un ordin conductibilitatea termică datorită împrăștierii suplimentare puternice a fononilor pe frontiere. Impuritățile, vacanțele unitare și duble, defectele „Stone-Wales” micșorează conductibilitatea termică a grafenului și a nanofâșiilor de grafen cu 50% - 80% în dependență de concentrația defectelor [6, 49, 57, 76-80].

Cercetarea influenței tensiunilor rețelei cristaline asupra conductibilității termice a fost efectuată în [74, 86-89, 98]. Autorii [89] au aratat, că tensiunile în NFG „armchair” ori „zigzag” de 5 nm majorează conductibilitatea termică cu 36 % în regimul balistic al transportului de căldură. În același timp, în regimul de difuzie al transportului de căldură tensiunile în rețeaua cristalină amplifică difuzia fonon-fononică „Umklapp” și conductibilitatea termică se micșorează de ~ 1.4 ori la TC [87]. Dispersia în datele experimentale referitoare la conductibilitatea termică

a grafenului cu tensiuni în rețeaua cristalină necesită cercetări suplimentare a mecanismelor transportului de căldură în astfel de grafen.

Un alt parametru-cheie, care influențează puternic conductibilitatea termică, este concentrația izotopilor [29, 46, 93, 95, 99-104]. Materialele carbonice naturale sunt formate de obicei din doi izotopi stabili  $^{12}\text{C}$  (~99%) și  $^{13}\text{C}$  (~1%). Majorarea concentrației izotopului  $^{13}\text{C}$  micșorează conductibilitatea termică în grafen și în NFG cu două ordine la TC din cauza amplificării împrăștierii fononilor pe defectele de masă [93, 95, 99-103].

Grafenul și nanofirele din grafen de asemenea demonstrează o dependență neobișnuită a conductibilității termice de dimensiunile geometrice ale mostrei și de forma ei [6, 49, 57, 61, 81-84, 94]. Utilizând ecuația cinetică Boltzmann, Nika et al. [57] au arătat, că conductibilitatea termică de rețea (la TC) a fâșii dreptunghiulare de grafen cu grosimea de 5  $\mu\text{m}$ , crește cu creșterea lungimii fâșii  $L$  până la  $\sim 40 - 200 \mu\text{m}$  în dependență de valoarea parametrului de difuzie superficială a fononilor, rămânând constantă pentru  $L > 50 - 1000 \mu\text{m}$ . Dependența de  $L$  a conductibilității termice poartă un caracter nemonoton, care se explică prin concurența dintre aporturile în conductibilitatea termică a două tipuri de fononi: care participă și care nu participă în difuzia superficială [57]. Lungimea mare a parcursului liber a fononului în grafen este parametrul determinant al acestui efect. Majorarea lățimii stratului ori amplificarea împrăștierii pe frontiere atenuază nemonotonia. Nemonotonia dispare de asemenea în peliculele pătrate și circulare din grafen în cazul difuziei superficiale puternice a fononilor (cu parametrul  $p < 0.5$ ).

În lucrările [81-83] a fost cercetată dependența conductibilității termice de lungimea nanofâșiei de grafen, utilizându-se dinamică moleculară [81-83]. Valori convergente au fost obținute pentru  $L > 16 \mu\text{m}$  [81] și  $L > 800 \text{ nm}$  [82-83]. Utilizând dinamică moleculară, Evans et al. [69] au arătat, că conductibilitatea termică a fâșiei dreptunghiulare din grafen  $\kappa \approx 8000 - 10000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la TC și nu depinde de lungimea fâșiei pentru  $L > 5 \text{ nm}$  [69]. La modificarea lățimii  $W$  a nanofâșiei, având o lungime constantă  $L = 10 \text{ nm}$ , în diapazonul de la 1 nm până la 10 nm, conductibilitatea termică a crescut de la 1000 până la 7000  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Cercetarea transportului de căldură neliniară în NFG dreptunghiulare și triunghiulare din grafen în condițiile aplicării unui gradient mare de temperaturi a fost efectuată în [105]. Autorii au arătat, că în NFG dreptunghiulare mici ( $\sim 6 \text{ nm}$ ) apare o rezistență diferențială negativă într-un anumit diapazon al temperaturilor aplicate. Cercetările, efectuate în [106], prezic, că rolul principal în transportul termic pentru NFG „zigzag” îl joacă efectele de rugozitate a suprarețelei și defectele rețelei. Cercetări experimentale a transportului de căldură în NFG din grafen au fost efectuate doar în câteva lucrări [107-108]. Utilizând metoda autoîncălzirii electrice, au fost măsurate valorile

conductibilității termice a nanofâșiilor cu o lungime mai mică de 20 nm, obținându-se valorile de  $80 - 150 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la TC [108] și de  $\sim 1000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la  $T \sim 700 - 800 \text{ K}$  [107].

Valorile experimentale și teoretice ale conductibilității termice de rețea în grafen, grafenul multistrat și în NFG, sunt prezentate în tabelele 1.1 și 1.2 la TC (dacă nu este indicată o altă temperatură). Descrierea mai detaliată a modelelor teoretice a transportului de căldură în materialele pe bază de grafen este prezentată în lucrările de sinteză [29, 46, 95, 109].

Tabelul 1.1. Conductibilitatea termică a grafenului monostrat.

$\kappa \text{ (Wm}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Metodă	Descrierea succintă	Referință
<b>Datele experimentale</b>			
$\sim 2000 - 5000$	Raman optothermal	„suspended”; exfoliat	47,48
$\sim 2500$	Raman optothermal	„suspended”; CVD	50
$\sim 1500-5000$	Raman optothermal	„suspended”; CVD	51
600	Raman optothermal	„suspended”; exfoliat; $T \sim 660 \text{ K}$	52
600	electric	„supported”; exfoliat	53
310 – 530	electric	exfoliat și CVD; $T \sim 1000 \text{ K}$	110
$2778 \pm 569$	Raman optothermal	„suspended”; CVD	111
$\sim 1700$	electric	„suspended”; CVD; lungimea stratului $\sim 9 \mu\text{m}$ ; dependența puternică de lungime	112
<b>Datele teoretice</b>			
1000 – 8000	ETB, $\gamma_{LA}$ , $\gamma_{TA}$	dependență puternică de dimensiunile spațiale	49
2000-8000	ETB, $\gamma_s(q)$	dependență puternică de lățime, parametrul Gruneisen și de rugozitatea frontierelor stratului	6
$\sim 2430$	ETB + constantele de interacțiune interatomice de ordinul trei (CI-3)	$\kappa \text{ (graphene)} \geq \kappa \text{ (carbon nanotube)}$	113
1500 – 3500	ETB + CI-3	dependență puternică de dimensiunile spațiale	66

100 – 8000	ETB	dependență puternică de lungimea, forma și de rugozitatea frontierelor stratului	57
2000 – 4000	abordare continuă + ETB	dependență puternică de concentrația defectelor și izotopilor și de tensiunile din rețeaua cristalină	61, 114
~ 4000	regimul balistic	dependență puternică de lățime	115
~ 2900	simulare MD	dependență puternică de concentrația vacanțelor	71
~ 20000	„VFF” + simulare MD	regimul balistic; lungimea stratului ~ 5 μm; dependență puternică de lungime și de lățimea stratului	116
100-550	simulare MD	lungimea stratului $L < 200$ nm; dependență puternică de lungime și de concentrația defectelor	78
~ 3000	simulare MD	lungimea stratului ~ 15 μm; dependență puternică de dimensiunile spațiale ale stratului	81
2360	simulare MD	$L \sim 5$ μm; dependență puternică de lungime	83
4000-6000	simulare MD	dependență puternică de tensiunile din rețeaua cristalină	87
~ 3600	ecuația Boltzmann-Peierls + teoria „density functional perturbation”	$L = 10$ μm; insensibilitate la tensiunile mici izotropice din rețeaua cristalină	117
~ 1250	simulare MD	$L = 100$ μm; dependență puternică de lungime pentru $L < 100$ μm	118
1800	simulare MD	stratul „suspended” cu dimensiunile 6 nm × 6 nm	85
1000-1300	simulare MD	stratul „Cu - supported” cu dimensiunile 6 nm × 6 nm; dependență puternică de interacțiunea între grafen și suport	

Tabelul 1.2. Fononi și transportul termic în materialele pe baza grafenului.

$\kappa$ (Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	Metodă	Descrierea succintă	Referință
<b>Datele experimentale</b>			
~1900	Raman optothermal	„suspended”; bistrat; $T \sim 320$ K	111
560-620	metoda „electrical self-heating”	„suspended”; bistrat; defecte polimerice pe suprafață	119
~1400	Raman optothermal	„suspended”; bistrat; „twisted”; $T \sim 320$ K	111
1300 – 2800	Raman optothermal	„suspended”; multistrat; exfoliat; $n=2-4$	54
50 – 970	metoda „heat-spreader”	multistrat; „SiO <sub>2</sub> – encased”; $n = 2, \dots, 21$	120
150 – 1200	metoda „electrical self-heating”	„suspended” și „supported”; multistrat; defecte polimerice pe suprafață	121
302-596	metoda „T-bridge”	„suspended”; multistrat; $n=2 – 8$ .	122
1100	metoda „electrical self-heating”	„supported”; multistrat; exfoliat; $n < 5$	107
80 – 150	metoda „electrical self-heating”	„suspended”; multistrat	108
<b>Datele teoretice</b>			
1000 – 4000	ETB, $\gamma_s(q)$	multistrat; $n = 8 – 1$ , dependență puternică de dimensiunile spațiale ale stratului	54
1000 – 3500	ETB + CI-3	multistrat; $n = 5 – 1$ , dependență puternică de dimensiunile spațiale ale stratului	66
2000-3300	ETB + CI-3	multistrat; $n = 4 – 1$	67
580 – 880	simulare MD	multistrat; $n = 5 – 1$ , dependență puternică de forțele van der Waals	72
1000 – 7000	simulare MD + potențialul Tersoff	NBG; dependență puternică de lățimea și de rugozitatea frontierelor stratului	69

~ 5500	ETB	NBG; lațime - 5 $\mu\text{m}$ ; dependență puternică de rugozitatea frontierelor stratului	91
~2000	simulare MD	NBG; $T=400\text{ K}$ ; $1.5\text{ nm} \times 5.7\text{ nm}$ „zigzag” NBG	97
30-80	simulare MD + potențialul AIREBO	NBG; 10 - „zigzag” and 19 - „arm-chair” NBG; dependență puternică de concentrația defectelor	77, 79
3200-5200	simulare MD	NBG; dependență puternică de lațimea ( $W$ ) și lungimea ( $L$ ); $9\text{ nm} \leq L \leq 27\text{ nm}$ și $4\text{ nm} \leq W \leq 18\text{ nm}$	80
400 – 600	simulare MD	NBG; $\kappa \sim L^{0.24}$ ; $100\text{ nm} \leq L \leq 650\text{ nm}$	82
100 – 1000	ETB	NBG; „SiO <sub>2</sub> -supported”	94
500 – 300	simulare MD	NBG; multistrat; 10-„ZGNR”, $n = 1, \dots, 5$	84

### 1.3. Concluzii la Capitolul 1

În acest capitol este prezentată sinteza diferitor posibilități ale ingineriei fononice în nanostructurile semiconductoare și în grafen. Se arată, că conductibilitatea termică și mobilitatea electronilor poate fi majorată prin alegerea corespunzătoare a parametrilor geometrici și materiali ai nanostructurii. Materialele în bază de grafen sunt candidaturi de perspectivă pentru ingineria fononică, deoarece conductibilitatea termică a lor depinde puternic de parametrii „*extrinseci*”: dimensiunile și forma stratului, concentrația defectelor și a izotopilor, tensiunilor în rețeaua cristalină și calitatea frontierelor stratului. Rezultatele descrise denotă faptul, că ingineria fononică este un mijloc puternic de îmbunătățire a conductibilităților termice și electrice la nivel nanometric. De aceea principalele scopuri ale tezei sunt formulate în felul următor:

- Dezvoltarea teoretică a conceptului ingineriei fononice pentru nanostructurile cvasi–unidimensionale și bidimensionale multistratificate din semiconductori și grafen;
- Demonstrarea posibilității de îmbunătățire a conductibilităților electrice și termice a acestor nanostructuri prin ingineria stărilor fononice ale lor.

Pentru atingerea acestor scopuri, au fost formulate următoarele *obiective*:

- Dezvoltarea modelelor teoretice ale fononilor și a transportului de căldură în structurile semiconductoare și în grafen;

- Cercetarea proprietăților electronice și a interacțiunii electron-fofonice în nanostructurile semiconductoare multistratificate plane;
- Cercetarea mecanismelor împrăștierii fononice în nanostructurile semiconductoare multistrat și în grafen;
- Optimizarea dimensiunilor și formei nanostructurilor pentru realizarea unui transport de căldură optimal și majorarea mobilității electronilor.



## 2. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURILE BIDIMENSIONALE SEMICONDUCTOARE

În acest capitol se realizează sinteza proprietăților fononice și a conductibilității termice în nanostructurile multistrat bidimensionale în bază de Si și GaN. Este prezentat conceptul de inginerie fononică în nanostructurile bidimensionale și se arată, că ingineria fononică oferă posibilități largi de îmbunătățire a conductibilității termice și a mobilității electronilor în nanostructurile 2D prin modificarea spectrului fononic al lor. Rezultatele, descrise în acest capitol, sunt luate din lucrările originale ale autorului referatorului științific [11, 14, 15, 29, 35, 37, 41-43, 123-125].

### 2.1. Ingineria spectrului energetic și a vitezelor de grup ale fononilor în nanostructurile semiconductoare bidimensionale

#### 2.1.1. Modelul continuu pentru fononi în nanostructurile 2D

Pentru cercetarea influenței straturilor de înveliș (de barieră) asupra spectrului energetic al fononilor acustici în nanostraturi, în acest capitol se cercetează nanostratul din GaN și nanostructura triplustratificată AlN/GaN/AlN [15, 123-125]. Imaginea schematică a acestori structuri este prezentată în Figura 2.1. Axele  $X_1$  și  $X_2$  ale sistemului cartezian ortogonal de coordonate sunt situate în planul straturilor, iar axa  $X_3$  – în direcție perpendiculară lor. Grosimea straturilor structurii triplustratificate simetrice este notată prin  $d_i$  ( $i=1,2,3$ );  $d_1=d_3$  (pentru simetrie) și grosimea totală a structurii este  $d = 2d_1 + d_2$ . În continuare se presupune, că straturile posedă o simetrie hexagonală, iar axa cristalografică este orientată de-a lungul axei  $X_3$

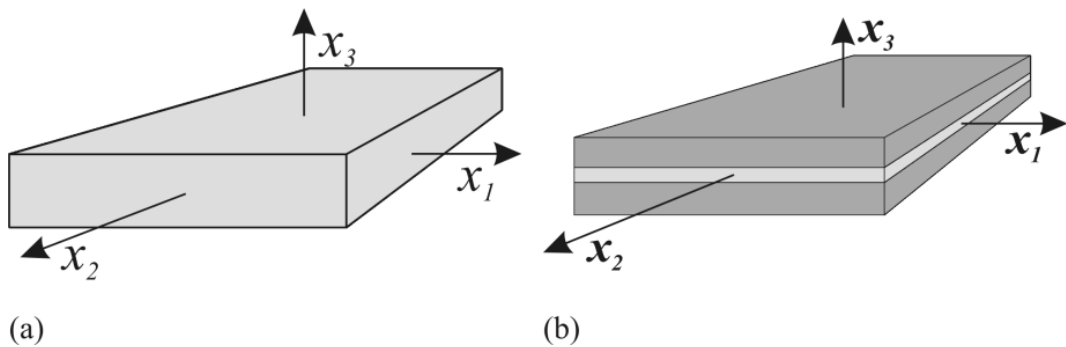


Fig. 2.1. Imaginea schematică a nanostratului cercetat (a) și a structurii triplustratificate cercetate (b).

Ecuția mișcării oscilațiilor elastice în mediul anizotropic poate fi scrisă în forma [126-127]:

$$\rho \frac{\partial^2 U_m}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{mi}}{\partial x_i}, \quad (2.1)$$

unde  $\vec{U}(U_1, U_2, U_3)$  – vectorul deplasării,  $\rho$  – densitatea,  $\sigma_{mi} = c_{mikj} U_{kj}$  – tensorul tensiunilor elastice și  $U_{kj} = 1/2(\partial U_k / \partial x_j + \partial U_j / \partial x_k)$  – tensorul de deformație,  $i=1,2,3$  și  $m=1,2,3$ . Deoarece structurile studiate sunt omogene în planul  $(X_1, X_2)$ , soluția Ecuației (2.1) poate fi căutată în forma [15, 125]:

$$U_i(x_1, x_3, t) = u_i(x_3) e^{i(\omega t - qx_1)} \quad (i=1,2,3), \quad (2.2)$$

unde  $u_i$  – amplitudinea componentelor vectorului deplasării,  $\omega$  – frecvența fononului,  $q$  – vectorul de undă al fononului și  $i$  - unitatea imaginară. Substituind Ecuația (2.2) în Ecuația (2.1), obținem un sistem din două ecuații diferențiale în raport cu  $u_1$  și  $u_3$  și o ecuație separată pentru  $u_2$ :

$$-\rho\omega^2 u_2(x_3) = c_{44} \frac{d^2 u_2(x_3)}{dx_3^2} + \frac{dc_{44}}{dx_3} \cdot \frac{du_2(x_3)}{dx_3} - c_{66} q^2 u_2(x_3), \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} -\rho\omega^2 u_1(x_3) &= -q^2 c_{11} u_1(x_3) + c_{44} \frac{d^2 u_1(x_3)}{dx_3^2} + \\ &+ q(c_{13} + c_{44}) \frac{du_3'(x_3)}{dx_3} + \frac{dc_{44}}{dx_3} \left( \frac{du_1(x_3)}{dx_3} + qu_3'(x_3) \right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} -\rho\omega^2 u_3'(x_3) &= -q^2 c_{44} u_3'(x_3) + c_{33} \frac{d^2 u_3'(x_3)}{dx_3^2} + \\ &+ \frac{dc_{33}}{dx_3} \frac{du_3'(x_3)}{dx_3} - q[(c_{44} + c_{13}) \frac{du_1(x_3)}{dx_3} + \frac{dc_{13}}{dx_3} u_1(x_3)] \end{aligned}$$

În Ecuațiile (2.3 – 2.4)  $u_3' = -iu_3$ , iar derivatele  $dc_{ik}/dx_3$  sunt responsabile de heterostructuritatea sistemului. Există două cazuri de limită pentru condițiile de frontieră: suprafețe exterioare libere (SEL) și suprafețe exterioare fixe (SEF). Progresul în tehnologia de confecționare a nanostraturilor, realizat în ultimul deceniu, a făcut posibilă creșterea nanostructurilor (cu dimensiuni spațiale nanometrice) și cu suprafețe exterioare libere („free-standing nanostructures”) [47-48, 53, 128-129]. Li et al. [128] au creat nanofire singulare „free-standing” din Si cu diametrul de  $\sim 22 - 115$  nm. Liu și Ashegi au confecționat nanostraturi „free-standing” din Si cu grosimea de 20 nm [129]. Balandin et al. [47-48] și Seol et al. [53] au efectuat cercetarea proprietăților termice ale grafenului „free-standing” mono- și multistrat atârnat. În cazul SEF, toate componentele forței pe suprafață sunt nule, adică  $P_1 = P_2 = P_3 = 0$ , unde  $P_i = \sigma_{ik} n_k$ , iar  $\vec{n}$  este normala la suprafașa exterioară a structurii,  $\vec{n} = (0, 0, n_3)$ . Astfel, pe suprafețele exterioare ale structurii trebuie să se îndeplinească următoarele condiții:

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_3} = 0, \quad \frac{du_1}{dx_3} + qu_3' = 0, \quad -qc_{13}u_1 + c_{33} \frac{du_3'}{dx_3} = 0. \quad (2.5)$$

Suprafețele exterioare fixe constituie un model teoretic, care nu poate fi realizat experimental. În acest caz se consideră, că toți atomii de suprafață sunt nemișcați și  $\vec{U} = 0$  pe suprafețele exterioare ale structurii, adică:

$$u_1 = u_2 = u_3 = 0. \quad (2.6)$$

Ecuția (2.3) descrie fononii cu polarizarea „shear”, la care vectorul deplasării  $\vec{U} = \vec{U}(0, U_2, 0)$ . Soluțiile Ecuției (2.4) descriu fononii cu polarizările „SA” și „AS”, având vectorul deplasării  $\vec{u}^{SA} = \vec{u}(u_1^S, u_3^A)$  și  $\vec{u}^{AS} = \vec{u}(u_1^A, u_3^S)$ . Indicii superiori (*S*) și (*A*) indică simetricitatea funcțiilor: *S* – funcția este simetrică în raport cu  $x_3$  și *A* – funcția este asimetrică în raport cu  $x_3$ . Polarizările „SA”, „AS” și „shear” formează un sistem complet de oscilații normale în structurile multistrat plane [15, 125]. În cazul stratului omogen polarizarea „SA” corespunde polarizării „dilatational”, iar polarizarea „AS” – polarizării „flexural” [15, 130].

Pentru obținerea spectrului energetic al fononilor acustici este necesar de soluționat Ecuțiile (2.3) și (2.4) cu condițiile de frontieră (2.5) în cazul SEL și (2.6) în cazul SEF. Metodele numerice a diferențelor finite ori a elementelor finite permit de a soluționa în mod eficient aceste ecuații [11-13, 15].

Particularitățile dispersiilor fononice se manifestă prompt asupra dependenței vitezelor de grup a fononilor de numărul de undă:

$$v_s^{SA, AS, sh}(q) = \frac{d}{dq} \omega_s^{SA, AS, sh}(q), \quad (2.7)$$

unde indicele *s* simbolizează numărul modei fononice cu polarizarea „SA”, „AS” ori „shear (sh)”. Utilizând Ecuția (2.7), au fost calculate vitezele de grup ale fiecărei mode fononice.

Pentru cercetarea evoluției spectrului energetic al fononilor în nanostructurile cu suprafețe exterioare libere ori fixe, noi vom cerceta nanostratul din siliciu cu SEL, nanostratul din siliciu cu SEF și nanostratul din siliciu acoperit cu înveliș din diamant [35]. În Figura 2.2 (a-d) sunt prezentate dispersiile fononilor SA în nanostratul din siliciu SEL (a), în structura triplustratificată Diamant/Si/Diamant cu diferite grosimi a învelișului din diamant (D) (b-c) și în nanostratul cu SEF (d), care corespunde cazului acoperirii nanostratului din siliciu cu înveliș din material absolut elastic. Grosimea nanostratului din siliciu în toate rezultatele prezentate este egală cu 2 nm, asigurându-se un confinment puternic al fononilor. Din Figura 2.2 rezultă faptul, că pentru numerele de undă *q*, energia fononilor fiecărei ramuri *s* în nanostratul cu SEL, este mai mică decât în nanostratul cu SEF. Nanostructura D/Si/D ocupă o poziție intermediară între aceste două

cazuri de limită. Este important de a menționa, că la temperatură joasă, dar nenulă  $T$ , în ramura fononică inferioară  $s=1$  din nanostratul cu SEL, există fononi cu populare mare  $N_{s=1}^f(\hbar\omega) = (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^{-1} \sim k_B T / \hbar\omega(q) > 1$ , în același timp în nanostratul cu SEF acești fononi lipsesc și  $N_{s=1}^c(\hbar\omega) \sim e^{-\hbar\omega/k_B T} \ll 1$ .

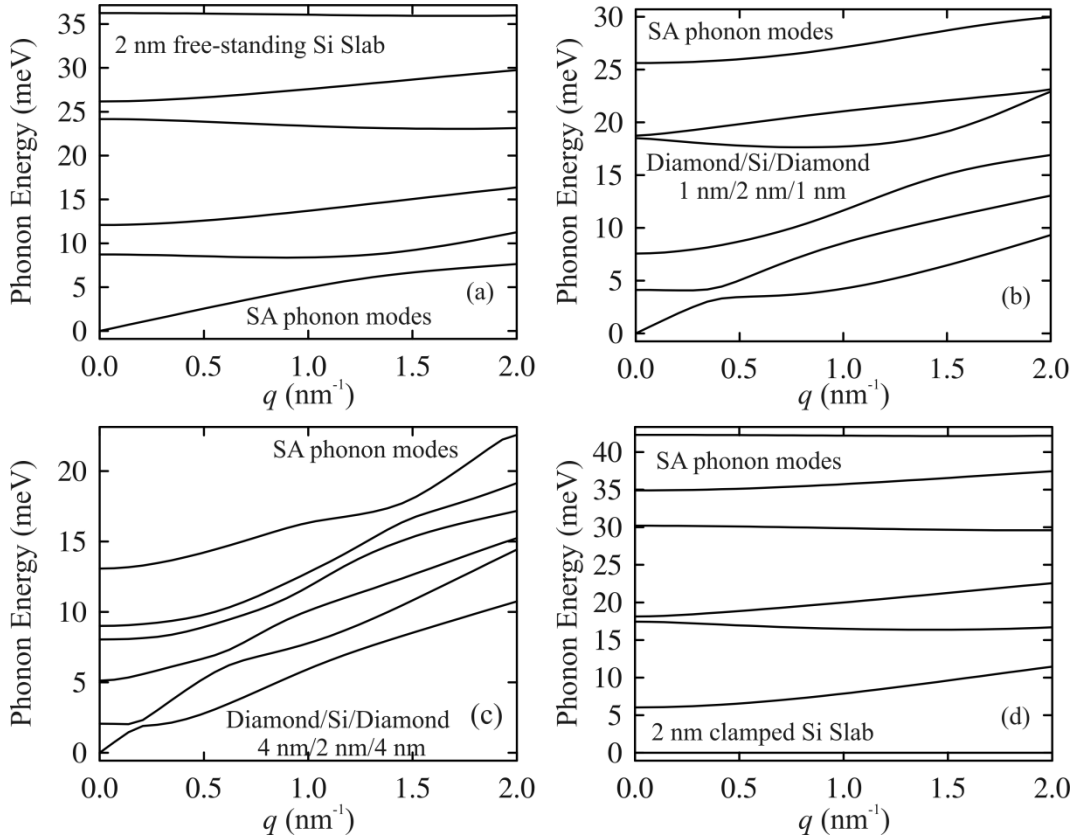


Fig. 2.2. Dispersia energiei fononilor acustici „SA” în stratul de siliciu cu suprafețe exterioare libere (a), în nanostructurile Diamant/Si/Diamant (b,c) și în stratul de siliciu cu suprafețe exterioare fixe (d). Desenul a fost retipărit din publicația [35] cu permisiunea “American Institute of Physics”.

Pentru ilustrarea posibilității de modificare puternică a vitezei de grup a fononilor prin alegerea diferitor învelișuri, vom precăuta două nanostructuri: nanostructura de tipul I – nanostratul din GaN, acoperit cu înveliș „lent” din plastic: plastic/GaN/plastic; cât și structura de tipul II – stratul subțire din plastic, acoperit cu înveliș „rapid” din Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/plastic/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Efectul de modificare a vitezei de grup a fononilor este ilustrat în Figura 2.3 (a), unde este arată dependența vitezelor medii de grup a fononilor de temperatură. Raportul vitezelor de grup în nanostructura de tipul I (3 nm/ 1 nm/ 3 nm) și în nanostratul din GaN:  $v(\text{hetero})/v(\text{GaN slab})=0.17$  pentru  $T = 20$  K. Acest raport se micșorează odată cu creșterea grosimii învelișului și pentru nanostructura de tipul I (10 nm/ 1 nm/ 10 nm) avem că  $v(\text{hetero})/v(\text{GaN slab})=0.16$ . La

TC raportul vitezelor pentru ambele nanostructuri este egal cu 0.26. Acest lucru denotă micșorarea vitezei medii de grup a fononilor în nanostructura de tipul I (cu înveliș „lent” din plastic) de 3.84 ori comparativ cu viteza în nanostratul din GaN. Raportul vitezelor în nanostructurile de tipul II cu dimensiunile (3 nm/ 1 nm/ 3 nm) și (10 nm/ 1 nm/ 10 nm) către viteza în nanostratul din plastic constituie respectiv 1,06 și 1,4 pentru  $T = 20$  K. La TC acest raport crește până la valorile 1,36 și 2,36. Astfel, acoperirea nanostratului cu înveliș „rapid” permite de a majora viteza medie a fononilor.

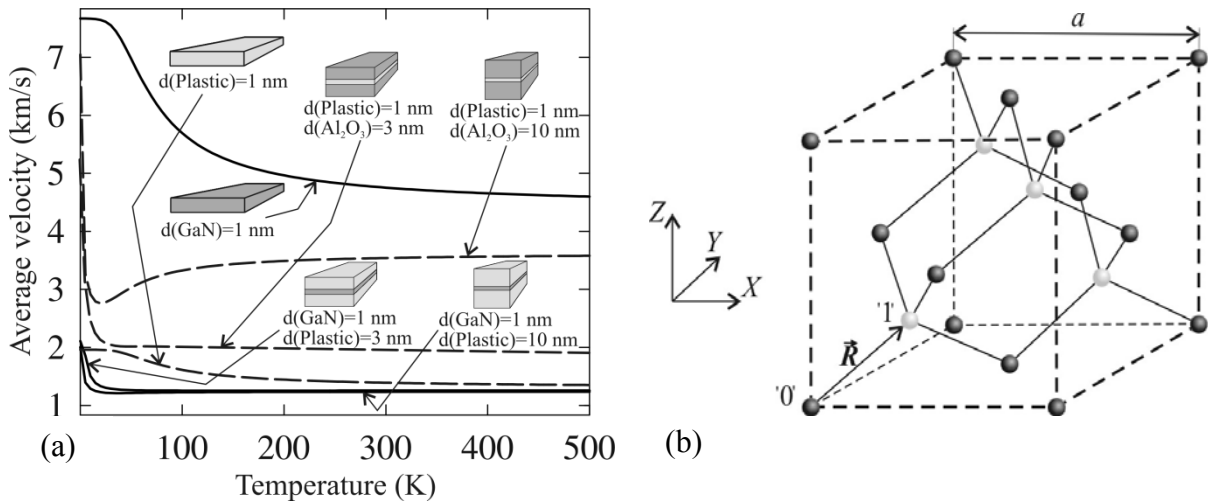


Fig. 2.3. (a) Vitezele de grup medii ale fononilor în dependență de temperatură pentru straturile din plastic și GaN, cât și pentru nanostructurile de tipul I și II. Rezultatele sunt prezentate pentru fononii cu polarizarea „SA” la două valori diferite ale grosimii învelișului. Desenul a fost retipărit din publicația [15] cu permisiunea “Elsevier”. (b) Imaginea schematică a rețelei cristaline de tip „diamant”. Atomii albi și negri se atribuie la diferite subrețele cubice cu fețe centrate.

### 2.1.2. Modelele dinamice ale oscilațiilor rețelei cristaline în nanostructurile 2D cu rețea cristalină de tipul „diamant”

#### Modelul „Face-centered cubic cell”

Rețeaua cristalină de tipul „diamant” constă din două subrețele cu fețe centrate, deplasate una față de alta cu  $\frac{1}{4}$  din diagonala principală a rețelei elementare (vezi Figura 2.3(b)). În cadrul modelului „Face-centered cubic cell (FCC)” cele două subrețele se preacută ca o rețea FCC cu mase duble ale atomilor în fiecare nod. Această simplificare duce la neglijarea fononilor optici, însă permite de a exprima parametrii modelului (cele trei constante de forță) prin modulii de elasticitate ai materialului. În rezultat, devine posibilă modelarea proprietăților acustice ale heterostructurilor, care sunt formate din straturi cu diferite proprietăți acustice și diferite grosimi.

În cadrul modelului FCC toate nodurile rețelei cristalului volumetric sunt echivalente din punct de vedere traslațional. De aceea deplasarea nodului  $\vec{n}$  poate fi scrisă în forma:

$$\vec{u}(\vec{n}; \vec{q}, t) = \vec{w}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}\vec{n} - \omega t)}, \quad (2.8)$$

unde  $\vec{w}(\vec{q})$  este amplitudinea vectorului deplasării, care nu depinde de timp. Ecuatiile de mișcare a nodurilor rețelei cristaline în materialul volumetric au forma:

$$m\ddot{u}_i(\vec{n}, \vec{q}) = F_i(\vec{n}, \vec{q}), \quad i = x, y, z. \quad (2.9)$$

unde  $F_i(\vec{n}, \vec{q})$  este componenta  $i$  a forței, care acționează asupra nodului  $\vec{n}$ , iar  $m$  – masa nodului (masa dublă a atomilor în modelul FCC). În aproximația armonică:

$$F_i(\vec{n}, \vec{q}) = -\frac{\partial V}{\partial u_i(\vec{n}, \vec{q})} = -\sum_{\vec{n}', j} \Phi_{ij}(\vec{n}, \vec{n}') u_j(\vec{n}', \vec{q}), \quad (2.10)$$

unde  $\Phi_{ij}(\vec{n}, \vec{n}')$  este matricea tridimensională a constantelor de forță, iar  $V$  - energia potențială a rețelei. Substituind Ecuatiile (2.8) și (2.9) în Ecuatia (2.10), obținem:

$$m\omega^2 w_i(\vec{q}) = \sum_{j=1,2,3,\vec{h}} D_{ij}(\vec{q}; \vec{h}) w_j(\vec{q}), \quad (2.11)$$

unde  $D_{ij}(\vec{q}; \vec{h}) = \Phi_{ij}(0, \vec{h}) e^{i\vec{q}\vec{h}}$  este matricea dinamică, iar  $\vec{h} = \vec{n}' - \vec{n}$ .

În cadrul modelului FCC se ține cont de interacțiunea nodului cu două cele mai apropiate sfere de coordinație. Interacțiunea cu cele mai apropiate 12 noduri se considera central-simetrică, fiind descrisă de o singură constantă  $\alpha_1^{FCC}$  [131]. Matricea constantelor de forță în acest caz are forma  $\Phi_{ij}(\vec{n}', \vec{n}) = -\alpha_1^{FCC} (\vec{n}', \vec{n}) h_i^1 h_j^1 / (h^1)^2$ , unde  $\vec{h}^1$  indică poziția celor mai apropiate noduri față de nodul  $\vec{n} = 0$ ,  $h_i^1$  este proiecția vectorului  $\vec{h}^1$  pe axa de coordonate  $X_i$ . Interacțiunea cu a doua sferă de coordinație nu este una central – simetrică și este descrisă de două constantele  $\alpha^{FCC}$  și  $\beta^{FCC}$  [132-133]. Vectorul  $\vec{h}^2$  descrie pozițiile a șase noduri din sfera a doua, cele mai apropiate de nodul  $\vec{n} = 0$ :

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}(0, \vec{h}^2 = a(\pm 1, 0, 0)) &= \delta_{ij} \gamma_{ii}, \gamma_{11} = \alpha^{FCC}; \gamma_{22} = \gamma_{33} = \beta^{FCC} \\ \Phi_{ij}(0, \vec{h}^2 = a(0, \pm 1, 0)) &= \delta_{ij} \gamma_{ii}, \gamma_{11} = \gamma_{33} = \beta^{FCC}; \gamma_{22} = \alpha^{FCC} \\ \Phi_{ij}(0, \vec{h}^2 = a(0, 0, \pm 1)) &= \delta_{ij} \gamma_{ii}, \gamma_{11} = \gamma_{22} = \beta^{FCC}; \gamma_{33} = \alpha^{FCC}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

În Ecuatia (2.12)  $\delta_{ij}$  reprezintă simbolul Kronecker. Comparând dispersia fononilor  $\omega(q)$  pentru trei ramuri fononice (una longitudinală și două – transversale), obținute din Ecuatia (2.11) în limita lungimilor de undă mari  $q \rightarrow 0$ , cu ecuațiile abordării continue (vezi Ecuatiile (2.3 – 2.4)), au fost stabilite următoarele relații dintre constantele  $\alpha_1^{FCC}$ ,  $\alpha^{FCC}$ ,  $\beta^{FCC}$  și modulii de

elasticitate ai cristalului cubic  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  și  $c_{13}$ :  $\alpha_1^{FCC} = a(c_{12} + c_{44})/2$ ,  $\alpha^{FCC} = a(c_{11} - c_{12} - c_{44})/4$  și  $\beta^{FCC} = a(c_{44} - c_{12})/8$ .

### Modelul „Born-von Karman”

Structura reală a celulei elementare se ia în calcul în cazul modelului „Born-von Karman” al oscilațiilor rețelei cristaline. Pentru comoditate, atomii primei subrețele se simbolizează ca atomii „negri”, iar atomii celei de-a doua subrețele – ca atomii „albi” (vezi Figura (2.3 (b))).

Matricea dinamică în modelul „BvK” forma  $D_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k) = \Phi_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k) / \sqrt{m(\vec{r}_k)m(\vec{r}'_k)}$ , unde  $m(\vec{r}_k)$  [ $m(\vec{r}'_k)$ ] este masa atomului  $\vec{r}_k$  [ $\vec{r}'_k$ ],  $\Phi_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k)$  – matricea constantelor de forță, iar  $\vec{h} = \vec{r}_k - \vec{r}'_k$ . Pentru atomul  $\vec{r}_k$ , sumarea în Ecuația (2.11) se face după atomii celor două sfere apropiate. În cazul siliciului ori germaniului prima sferă atomică pentru atomul  $\vec{r}_k$  conține 4 atomi cu vectorul de poziție  $\vec{r}'_{k,n} = \vec{r}_k + \vec{h}_n^I$  ( $n=1, \dots, 4$ ), iar ce-a de-a doua sferă conține 12 atomi cu vectorul de poziție  $\vec{r}'_{k,n} = \vec{r}_k + \vec{h}_n^{II}$  ( $n=1, \dots, 12$ ). Componentele vectorilor  $\vec{h}_n^I$  și  $\vec{h}_n^{II}$  sunt prezentate în Tabelul I din [134]. În modelul „BvK” dezvoltat, interacțiunea atomilor este descrisă de următoarele matrici ale constantelor de forță:

$$\Phi_{ij}^I = (16/a^2)(\alpha\delta_{ij} + \beta(1-\delta_{ij}))h_{n,i}^I h_{n,j}^I \quad (2.13)$$

pentru atomii primei sfere de influență ( $n=1, \dots, 4$ ) și

$$\Phi_{ij}^{II} = (4/a^2)(\lambda\delta_{ij}(a^2/4 - h_{n,i}^{II}h_{n,i}^{II}) + \mu\delta_{ij}h_{n,i}^{II}h_{n,i}^{II} + \chi(1-\delta_{ij})h_{n,i}^{II}h_{n,j}^{II}) \quad (2.14)$$

pentru atomii din cea de a doua sferă ( $n=1, \dots, 12$ ), unde  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\mu$ ,  $\lambda$  și  $\chi$  sunt constantele de forță ale modelului „BvK”. Matricea constantelor de forță  $\Phi_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k = \vec{r}_k)$  a fost obținută din condiția egalității cu zero a forței, care acționează asupra atomului  $\vec{r}_k$  în cazul echilibrului, adică

$$\Phi_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k = \vec{r}_k) + \sum_{\vec{r}'_k} \Phi_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k \neq \vec{r}_k) = 0.$$

Soluționând Ecuația mișcării (2.11) în punctele  $\Gamma$  și  $X$  ale zonei Brillouin în cristalul volumetric, noi am exprimat trei constante de forță  $\alpha$ ,  $\mu$  și  $\lambda$  prin constanta  $\beta$  și frecvențele fononilor în punctele  $\Gamma$  și  $X$ :  $\alpha = m\omega_{LO}^2(\Gamma)/8$ ,  $\mu = m(2\omega_{LA}^2(X) - \omega_{LO}^2(\Gamma))/32$  și  $\lambda = m(4\omega_{TO}^2(X) - 2\omega_{LA}^2(X) - \omega_{LO}^2(\Gamma))/32 - \beta/2$ .

La calcularea dispersiilor fononice constantele  $\beta$ , și  $\chi$  sunt parametri de ajustare. Pentru cristalele volumetrice de siliciu și germaniu aceste constante au fost determinate în [134-135] prin compararea dispersiilor calculate cu dispersiile experimentale din lucrările [136-137]. Au fost obținute următoarele valori pentru constantele modelului „BvK” în siliciu și germaniu:

$$\alpha_{Si} = 54.85 \text{ N/m}, \quad \beta_{Si} = 35.0 \text{ N/m}, \quad \mu_{Si} = 3.8 \text{ N/m}, \quad \chi_{Si} = 2.5 \text{ N/m}, \quad \lambda_{Si} = -4.42 \text{ N/m};$$

$$\alpha_{Ge} = 49.6 \text{ N/m}, \quad \beta_{Ge} = 33.0 \text{ N/m}, \quad \mu_{Ge} = 3.03 \text{ N/m}, \quad \chi_{Ge} = 3.03 \text{ N/m}, \quad \lambda_{Ge} = -3.0 \text{ N/m}.$$

În nanostructurile cvazi-bidimensionale amplitudinea vectorului deplasării devine dependentă de coordonata atomului de-a lungul axei  $Z$ , perpendiculară suprafeței nanostructurii. De aceea, soluția Ecuției (2.9) se caută în forma:

$$\vec{u}(\vec{n}(\vec{n}_{xy}, n_z); \vec{q}, t) = \vec{w}(\vec{q}; n_z) e^{i(\vec{q}\vec{n} - \omega t)}, \quad (2.15)$$

unde  $\vec{n}_{xy}$  și  $\vec{q}$  sunt vectori bidimensionali,  $n_z$  indică poziția stratului atomic corespunzător.

Substituind (2.15) în (2.9), obținem:

$$m\omega^2 w_i(n_s, \vec{q}) = \sum_{n'_s} \sum_{j=x,y,z} D_{ij}(n_s, n'_s) w_j(n'_s, \vec{q}), \quad i = x, y, z \quad (2.16)$$

$$D_{ij}(n_s, n'_s) = \Phi_{ij}(n_s, n'_s) \exp[i\vec{q} \times (\vec{r}(n'_s) - \vec{r}(n_s))]$$

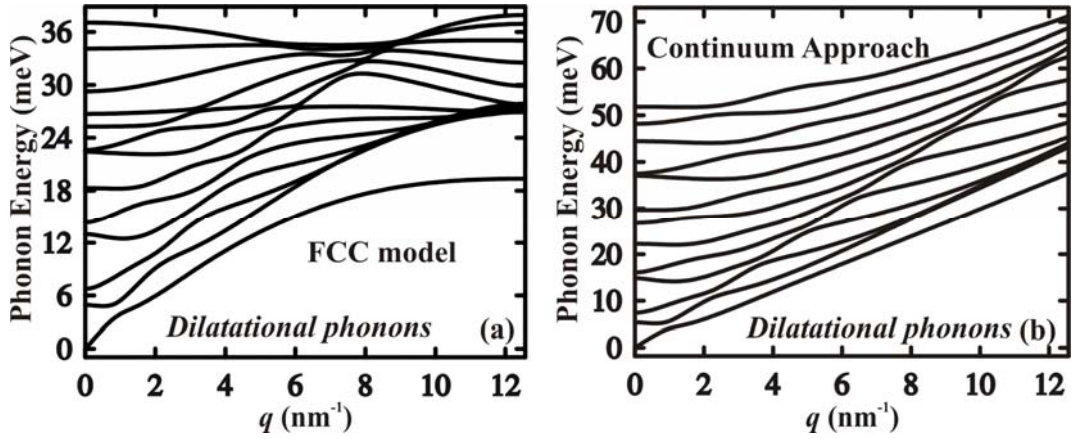


Fig. 2.4. Energiile fononilor ca funcții de numărul de undă în nanostratul din Si cu grosimea  $d = 3.258 \text{ nm}$ , calculate în cadrul (a) modelului „FCC” și (b) în cadrul aproximației continue.

În Figura 2.4 sunt prezentate dispersiile fononice în nanostratul din siliciu cu grosimea  $d=3.258 \text{ nm}$  (13 straturi atomare în rețeaua FCC), calculate în cadrul modelului FCC (a) și a abordării continue (b). O deosebire importantă dintre modelele dinamice ale oscilațiilor și abordarea continuă este determinarea numărului total de mode fononice. În modelele dinamice acesta este un număr finit, egal cu numărul total de grade de libertate ale nanostructurii. În abordarea continuă numărul de mode fononice este formal infinit și este necesar de a limita spectrul energetic al fononilor. În Figura 2.4 numărul modelor fononice în abordarea continuă s-a determinat din condiția:  $N_{\max}^{\text{Continuum}} = N_{\max}^{\text{FCC}}$ , de aceea numărul ramurii superioare  $s_{\max} = 13$  în ambele cazuri.

Spectrul energetic al fononilor în nanostratul din siliciu cu grosimea  $d = 10 \text{ nm}$ , calculat în cadrul modelului „BvK” de-a lungul direcției cristalografice  $[100]$ , este prezentat în



Figura 2.5(a). Modelul FCC descrie partea spectrului energetic al fononilor, care corespunde energiilor joase ale fononului, într-un acord bun cu modelul „BvK”. Diferența dintre aceste modele se manifestă tot mai puternic odată cu creșterea energiei. Modele fononilor optici cu energii mai mari de 36 meV sunt prezente doar în spectrul obținut cu ajutorul modelului „BvK”.

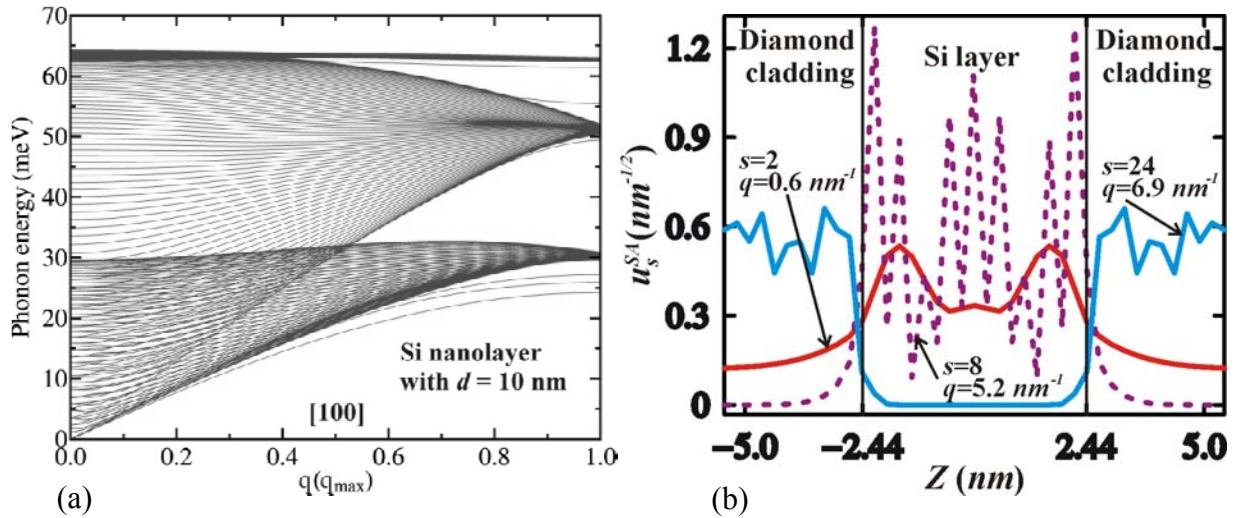


Fig. 2.5. (a) Spectrul energetic al fononilor în nanostratul de siliciu cu grosimea de 10 nm, calculat în cadrul modelului „BvK”. (b) Amplitudinile vectorului deplasării în dependență de coordonata  $z$  în nanostructura D/Si/D. Rezultatele sunt prezentate pentru trei mode fononice acustice: moda „Si-like” ( $s=8$ ,  $q=5.25 \text{ nm}^{-1}$ ) (linia punctiformă), moda hibridă ( $s=2$ ,  $q=0.6 \text{ nm}^{-1}$ ) (linia continuă) și moda „diamond-like” ( $s=24$ ,  $q=6.9 \text{ nm}^{-1}$ ) (linia continuă). Desenul a fost montat din publicațiile [37, 123].

Modele fononice în nanostructurile triplustratificate pot fi clasificate în trei tipuri diferite: mode hibride, mode „core-like” și mode „cladding-like”. Modele hibride se propagă în toate straturile nanostructurii și se caracterizează prin proprietăți mixte ale stratului interior și a învelișurilor. Modele „core-like” sunt concentrate în temei în stratul interior, iar amplitudinea lor se micșorează brusc în straturile de înveliș. Modele „cladding-like” sunt situate în straturile de înveliș și pătrund slab în stratul interior. Amplitudinea vectorului deplasării pentru modele „core-like”, hibride și „cladding-like” în nanostructura D/Si/D sunt ilustrate în Figura 2.5(b).

## 2.2. Ingineria fononică a conductibilității termice în structurile multistratificate cu canal interior din siliciu

Fluxul de căldură, transportat de fononi, are forma [138]:

$$\vec{W} = \sum_{s,\alpha,\vec{q}} \vec{v}(s,\vec{q}) \hbar \omega_s(\vec{q}) N(\vec{q}, \omega_s(\vec{q})) = \sum_{s,\alpha,\vec{q}} \vec{v}(s,\vec{q}) \hbar \omega_s(\vec{q}) n(\vec{q}, \omega_s), \quad (2.17)$$

În Ecuția (2.17) sumarea se face după toate modele fononice  $s$  cu polarizarea  $\alpha$ . Numărul fononilor în fluxul de căldură:  $N(\omega, \vec{q}) = N_0(\omega, \vec{q}) + n(\omega, \vec{q})$ , unde  $N_0 = 1/(\exp(\hbar\omega/(k_B T)) - 1)$  este funcția de distribuție Bose-Einstein, iar  $n$  – partea neechilibrată a funcției  $N$ . În aproximația perioadei de relaxare funcția  $n$  poate fi exprimată prin perioada  $\tau$  de relaxare a fononilor:

$$n = -\tau(\vec{v} \cdot \nabla T) \frac{\partial N_0}{\partial T}, \quad (2.18)$$

unde  $\nabla T$  este gradientul de temperatură. Substituind Ecuția (2.18) în Ecuția (2.17) și utilizând definiția macroscopică a conductibilității termice, vom obține următoarea formulă pentru tensorul de conductibilitate termică:

$$\kappa_{ij} = \frac{1}{L_x L_y L_z} \sum_{s, \alpha, \vec{q}} \tau_{tot}(s, \alpha, \vec{q}) v_i(s, \alpha, \vec{q}) v_j(s, \alpha, \vec{q}) \frac{\partial N_0(\omega_{s, \alpha})}{\partial T} \hbar \omega_{s, \alpha}(\vec{q}). \quad (2.19)$$

În Ecuția (2.19)  $L_x$ ,  $L_y$  și  $L_z$  reprezintă dimensiunile mostrei, iar  $\tau_{tot}$  – perioada totală de difuzie a fononilor. Elementul diagonal al tensorului, care corespunde fluxului de căldură în direcția gradientului de temperatură, poate fi scris în forma:

$$\kappa \equiv \kappa_{ii} = \frac{1}{L_x L_y L_z} \sum_{s, \alpha, \vec{q}} \tau_{tot}(s, \alpha, \vec{q}) v^2(s, \alpha, \vec{q}) \cos^2 \varphi \frac{\partial N_0(\omega_{s, \alpha})}{\partial T} \hbar \omega_{s, \alpha}(\vec{q}). \quad (2.20)$$

Dacă în Ecuția (2.20) trecem de la sumarea după modele fononice la integrare și dacă ținem cont de densitatea bidimensională a stărilor fononice, obținem următoarea expresie:

$$\kappa_{2D} = \frac{1}{4\pi k T^2 d} \sum_{s, \alpha} \int_0^{q_{max}} ([\hbar \omega_{s, \alpha}(q) v_{s, \alpha}(q)]^2 \tau_{tot}(s, \alpha, q) \frac{\exp(\hbar \omega_{s, \alpha}(q) / k T)}{(\exp(\hbar \omega_{s, \alpha}(q) / k T) - 1)^2} q) dq, \quad (2.21)$$

unde  $d$  este grosimea stratului 2D. Sumarea în formula (2.21) se face după toate modele fononice  $s$  de la 1 până la  $S_{max}$ , având polarizarea  $\alpha$ .

Mecanismele principale de împrăștiere a fononilor în nanostructurile semiconductoare sunt difuzia 3-fononică „Umklapp”, împrăștierea pe defectele punctiforme și dislocații și împrăștierea pe frontierele nanostructurii. Considerând, că toate mecanismele de împrăștiere sunt independente între ele, perioada totală de difuzie se determină conform regulii Matthiessen [7-10, 38-40]:

$$1/\tau_{tot}(\alpha, s, q) = 1/\tau_U(\alpha, s, q) + 1/\tau_{PD}(\alpha, s, q) + 1/\tau_{Disl}(\alpha, s, q) + 1/\tau_B(\alpha, s, q), \quad (2.22)$$

unde:

$$\begin{aligned} 1/\tau_U(\alpha, s, q) &= (\gamma^2 k_B T \omega_s^\alpha) / (\rho V_0 \omega_{\alpha, max}^s (v_s^\alpha)^2), \\ 1/\tau_{PD}(\alpha, s, q) &= (S_0 \Gamma q (\omega_s^\alpha)^2) / (4 v_s^\alpha), \\ 1/\tau_{Disl}(\alpha, s, q) &= \eta N_D (V_0)^{4/3} \omega_s^3 / (v_s^\alpha)^2, \\ 1/\tau_B(\alpha, s, q) &= v_s^\alpha / d \times (1-p) / (1+p). \end{aligned} \quad (2.23)$$

În Ecuatiile (2.23)  $\gamma$  reprezintă parametrul de anarmonicitate „Gruneisen”,  $\Gamma$  caracterizează intensitatea împrăștierii pe defectele punctiforme,  $N_D$  – densitatea dislocațiilor,  $\eta$  ține cont de orientarea reciprocă a dislocației și a gradientului de temperatură,  $V_0$  – volumul care revine unui atom,  $S_0$  – suprafața care revine unui atom,  $\omega_{\alpha, \max}^s$  – frecvența maximală a modei fononice ( $s, \alpha, q$ ) și  $p$  – parametrul difuziei superficiale a fononilor. Pentru reproducerea dependenței de temperatură a conductibilității termice de rețea în nanostructurile și nanofirele semiconductoare, de multe ori în loc de (2.23) se utilizează următoarea formulă empirică pentru împrăștieria „Umklapp” [123, 139]:

$$1/\tau_U(\alpha, s, q) = B \cdot \omega_{s, \alpha}^2(q) \cdot T \cdot \exp(-C/T). \quad (2.24)$$

În Ecuatia (2.24)  $B$  și  $C$  reprezintă parametrii, care se determină prin compararea conductibilităților termice calculată și măsurată ale materialului volumetric.

În Figura 2.6(a) este prezentată dependența conductibilității termice fononice de temperatură pentru diferite valori ale parametrului difuziei superficiale  $p = 0.4, 0.6$  și  $0.8$ . Conductibilitatea termică a fost calculată conform formulei (2.21) pentru perioada totală de difuzie, descrisă de formula (2.23). În calcul s-au utilizat următoarele valori ale parametrilor:  $\gamma=0.8$ ,  $\Gamma = 0.8356 \times 10^{-3}$  [140],  $N_D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\eta=0.55$  [141].

Curbele continue și întrerupte din Figura 2.6(a) corespund modelului FCC și abordării continue, corespunzător. Abordarea continuă majorează esențial valorile conductibilității termice pentru  $T > 70 \text{ K}$ . Această majorare se explică prin mersul incorect al curbelor de dispersie, calculate în abordarea continuă, în cazul valorilor înalte pentru  $q$  și viteza de grup a fononilor în apropierea frontierei zonei Brillouin. Raportul conductibilităților termice, calculate în cadrul modelului FCC și a abordării continue, crește odată cu creșterea temperaturii datorită populării modelor fononice cu energie înaltă: raportul  $\kappa_{FCC} / \kappa_{Continuum}$  egal cu 1.05 pentru  $T=50 \text{ K}$  ( $p=0.4$ ) și  $\kappa_{FCC} / \kappa_{Continuum} = 4.5$  pentru  $T=400 \text{ K}$  ( $p=0.4$ ). Modificarea valorii parametrului  $p$  influențează slab raportul conductibilităților termice: la temperatura  $T=400 \text{ K}$  raportul  $\kappa_{FCC} / \kappa_{Continuum}$  este egal cu 4.5 pentru  $p=0.4$  și 4.8 pentru  $p = 0.8$ .

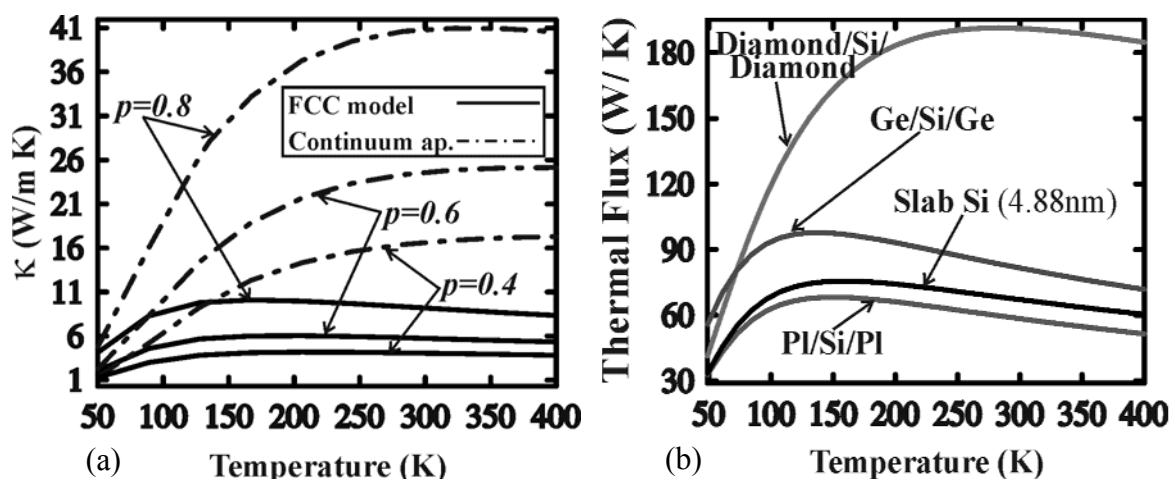


Fig. 2.6. (a) Conductibilitatea termică fononică ca funcție de temperatură la diferite valori ale parametrului de difuzie superficială  $p = 0.4, 0.6$  și  $0.8$ . Rezultatele sunt prezentate pentru modelul „FCC” (liniile continui) și aproximația continuă (liniile întrerupte). (b) Dependența fluxului de căldură  $W_{ph}$  de temperatură pentru nanostructurile în bază de siliciu. Desenul a fost montat din publicațiile [37, 124].

Posibilitatea de derijare a fluxului de căldură a conductibilității termice de rețea prin metodele ingineriei fononice, este ilustrată în Figura 2.6(b). Fluxul de căldură care revine la o unitate a gradientului de temperatură și o unitate a grosimii nanostructurii, are forma:  $W_{2D} = \kappa_{2D} \cdot d$ . Dependența valorilor lui  $W_{2D}$  de temperatură în nanostructurile pe bază de siliciu este prezentată în Figura 2.6(b). Fluxul de căldură în stratul omogen de siliciu cu grosimea  $d = 19$  ML a fost de asemenea ilustrat pentru comparare.

Curbele fluxului de căldură în nanostructura PI/Si/PI demonstrează un efect neobișnuit: adăugarea canalelor suplimentare de evacuare a căldurii (învelișul din plastic) micșorează fluxul termic comparativ cu stratul omogen fără înveliș. Fluxul de căldură se micșorează de 1.1-1.2 ori comparativ cu stratul omogen cu toate că grosimea nanostructurii PI/Si/PI este de 2.2 ori mai mare decât a stratului omogen. Acest efect se explică prin modificarea puternică a spectrului fononilor acustici în heterostructură și prin apariția modelor fononice hibride. Modele fononice în heterostructurile Diamant/Si/Diamant ori PI/Si/PI pot fi separate în trei tipuri: mode fononice hibride, care sunt distribuite în stratul de siliciu și în înveliș; modele „Si-like”, care sunt concentrate în stratul de siliciu și modele „cladding”, care sunt distribuite doar în înveliș. Modele fononice hibride cu energie înaltă din nanostructura Diamant/Si/Diamant majorează puternic fluxul de căldură într-un diapazon larg de temperaturi  $T > 100$  K. Raportul fluxurilor de căldură în nanostructura cu înveliș din diamant și în stratul omogen de siliciu, se majorează odată cu creșterea temperaturii cu urmare a populării modelor „diamant-like” de energie înaltă și de viteză

înalță. În rezultat, învelișul din diamant majorează de trei ori fluxul de căldură la TC. Această amplificare se explică atât prin modificarea spectrului fononic, cât și prin majorarea grosimii nanostructurii comparativ cu stratul omogen din siliciu.

### 2.3. Ingineria fononică a mobilității electronilor în nanostructurile 2D cu canal conductibil din Si și GaN

Unul din principalele mecanisme de împrăștiere a electronilor în semiconductorii volumetrici, care limitează mobilitatea electronilor la temperatura camerei și la temperaturi mai înalte, este împrăștierea electron-fofonică [2]. Intensitatea acestei împrăștieri în nanostructurile semiconductoare depinde atât de spectrul energetic și funcțiile de undă ale electronului, cât și de dispersia fononilor optici și acustici. Modificând forma, dimensiunile și parametrii materiali ai nanostructurii, se poate în mod eficient de influențat spectrul energetic al electronilor și fononilor [7-9, 29, 142-143].

Frecvent la calcularea mobilității electronilor în nanostructuri se cercetează două cazuri de limită: (i) – cazul canalului conductibil „masiv” și (ii) – cazul canalului conductibil „foarte subțire”. În primul caz se utilizează abordarea obișnuită și nu se ține cont de confinamentul electronilor, confinamentul fononilor și de interacțiunea electronului cu fononii superficiali. În cel de-al doilea caz se presupune, că este populată doar minibanda electronică de bază și se neglijează tranzițiile electronice dintre subbenzi [144,145].

Însă în nanostructurile cu canal conductibil, având grosimea  $d > 5$  nm, diferența între energia minibenzilor electronice  $\Delta\varepsilon_{n,n-1} = \varepsilon_n^0 - \varepsilon_{n-1}^0$  ( $\varepsilon_n^0$  este energia minibenzii  $n$ ) poate fi mai mică decât energia fononului și tranzițiile dintre subbenzile electronice vor juca un rol important [41-42].

În scopul luării în calcul a tranzițiilor dintre subbenzi în nanostructurile 2D, în lucrarea [41] a fost evidențiat sistemul din două ecuații integrale față de perioada de difuzie de transport. Acest sistem de ecuații a fost obținut din ecuația Boltzmann [146, 147] prin modificarea ei pentru luarea în calcul a dispersiei fononilor. Ecuațiile modificate, obținute în aproximația zonelor Brillouin sferice pentru electron, au forma [41]:

$$\sum_{\substack{\vec{p}', m = \pm 1, \\ \lambda, n' = 1, 2}} [W(n, \vec{p} \rightarrow n', \vec{p}') \frac{(1 - f^0(\varepsilon_n + m \cdot \hbar \omega_\lambda(q)))}{(1 - f^0(\varepsilon_n))} (\tau_n(\vec{p}) - \tau_{n'}(\vec{p}')) \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}'}{p^2}] = 1, \quad (2.25)$$

unde  $n=1, 2$  reprezintă numărul cuantic al subbenzii electronice. În Ecuațiile (2.25)  $W(\gamma \rightarrow \gamma') =$

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \gamma | \hat{H}_{\text{int}} | \gamma' \rangle \right|^2 \delta(E_\gamma - E_{\gamma'})$$

este probabilitatea tranziției sistemului electron-fofonic din starea

$\gamma$  cu energia  $E_\gamma$  în starea  $\gamma'$  cu energia  $E_{\gamma'}$ ,  $\hat{H}_{int}$  – Hamiltonianul interacțiunii electron- fononice,  $f^0(\varepsilon) = (\exp((\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T) + 1)^{-1}$ ,  $\varepsilon$  reprezintă energia electronului,  $\vec{p}$  și  $\vec{p}'$  - impulsurile electronului în starea inițială și finală, corespunzător,  $\lambda$  – numărul ramurii fononice,  $\tau_1(\varepsilon)$  – perioada cinetică de difuzie a fononului, care include în sine tranzițiile electronice din prima subbandă ( $1 \leftarrow \rightarrow 1$ ) și tranzițiile din prima în a doua subbandă ( $1 \rightarrow 2$ ),  $\tau_2(\varepsilon)$  - perioada cinetică de împrăștiere a electronului în cea de a doua subbandă (care include în sine tranzițiile ( $2 \rightarrow 1$ ) și ( $2 \leftarrow \rightarrow 2$ )).

Mobilitatea electronilor s-a calculat din ecuația, care s-a obținut la generalizarea formalismului standard [1] pentru cazul tranzițiilor dintre subbenzi [41-42]:

$$\mu(T) = \frac{e}{k_B T} \frac{\sum_{n=1}^2 \frac{1}{m_{\perp,n}} \int_0^\infty \varepsilon \tau_n(\varepsilon) f^0(\varepsilon) (1 - f^0(\varepsilon)) d\varepsilon}{\sum_{n=1}^2 \int_0^\infty f^0(\varepsilon_n^0 + \varepsilon) d\varepsilon}, \quad (2.26)$$

unde  $m_{\perp,n}$  reprezintă masa efectivă a electronului, mediată pe funcțiile de undă ale subbenzii  $n$ . Hamiltonianii interacțiunii electronului cu fononii de confinament și fononii de interfață optici în nanostructurile AlN/GaN/AlN cu rețea de tip „wurtzite”, au fost preluați din [148]. Interacțiunea electronului cu fononii acustici în nanostructurile pe bază de siliciu, este descrisă cu ajutorul Hamiltonianului potențialului de deformație [14, 35]. Descierea mai detaliată a modelului teoretic și a procedurii de calculare numerică a mobilității este prezentată în lucrările originale ale autorului acestui Referat [14, 35, 41-42].

### **Majorarea mobilității electronului în nanostructurile AlN/GaN/AlN și Diamant/Si/Diamant cu rețea de tip „wurtzite”**

Câmpul electric puternic încorporat, care este caracteristic pentru interfețele AlN/GaN, creează în interiorul canalului conductibil din GaN o groapă potențială triunghiulară pentru electroni. Compensând câmpul electric încorporat prin aplicarea câmpului electric exterior sau prin crearea unui nanostrat din  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  în centrul canalului din GaN, putem schimba poziția maximumului funcțiilor de undă ale electronului. Aceasta, la rândul său, permite de a influența interacțiunea electron-fononică și în unele condiții – de a majora mobilitatea electronului. În Figura 2.7 (a) este prezentată dependența de temperatură a mobilității electronului în nanostructura AlN/GaN/AlN. Majorarea concentrației gazului electronic bidimensional duce la micșorarea mobilității electronului din cauza amplificării tranzițiilor dintre subbenzi (crește mărimea  $\hbar\omega - (\varepsilon_2^0 - \varepsilon_F)$ ). Micșorarea intensității câmpului exterior și creșterea mărimii  $F = F_{built}$

în  $-F_{ext}$  majorează distanța dintre subbenzi, iar tranzițiile din interiorul subbenzilor devin unicul mecanism de împrăștiere. Câmpul electric rezultat cu  $F \neq 0$ , pe de o parte – atenuază tranzițiile dintre subbenzi iar, pe de altă parte – amplifică tranzițiile din interiorul subbenzilor. Concurența acestor două efecte duce la o dependență nemonotonă de  $F$  a mobilității.

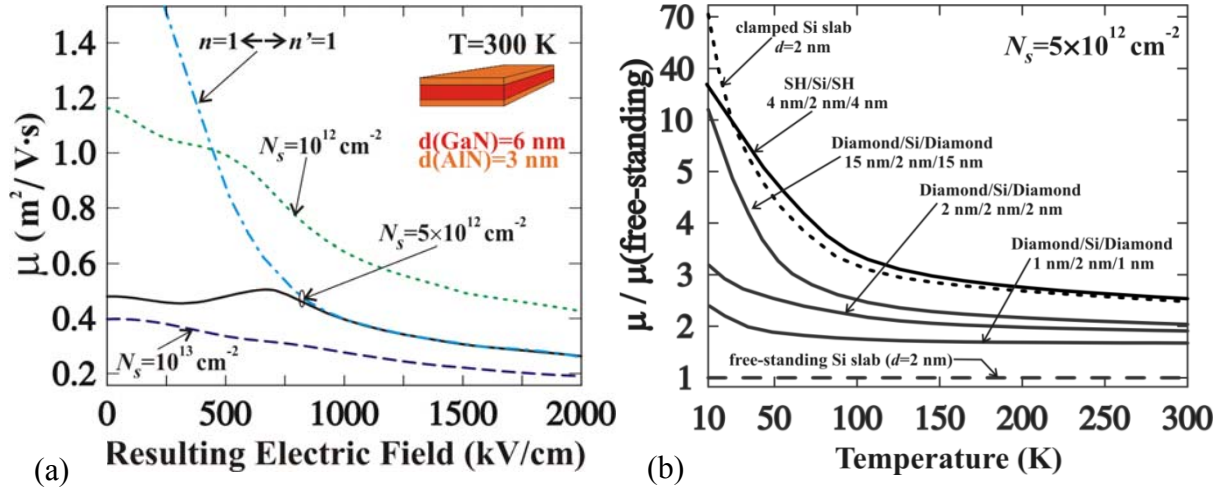


Fig. 2.7. (a) Mobilitatea electronilor în dependență de câmpul electric orientat perpendicular structurii AlN/GaN/AlN pentru trei valori ale concentrației electronilor. Linia punctiformă și linia întreruptă indică mobilitatea calculată ținând cont doar de împrăștierile în subbanda fundamentală ( $N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ). (b) Coeficientul de majorare a mobilității electronilor ca funcție de temperatură pentru concentrația bidimensională a electronilor  $N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Desenul a fost montat din publicațiile [35, 41] cu permisiunea “American Institute of Physics”.

În nanostructurile Diamant/Si/Diamant (D/Si/D) cu grosimea straturilor de câțiva nm, electronii (golurile) se află în stratul interior din Si, iar fononii sunt distribuiți în toată nanostructura. Creșterea straturilor cristaline de diamant este o problemă tehnologică complicată. Necătând la aceasta, structurile de siliciu pe diamant și de diamant pe siliciu au fost deja obținute [149]. Dezvoltarea ulterioară a tehnologiei va permite obținerea și a nanostructurilor din siliciu cu înveliș din diamant. Modificarea spectrului energetic al fononilor în nanostructurile D/Si/D și apariția modelelor hibride duc la suprimarea interacțiunii electron-fononice comparativ cu stratul din siliciu fără înveliș. În Figura 2.7 (b) este prezentat coeficientul de amplificare a mobilității electronului în nanostructura D/Si/D comparativ cu mobilitatea în nanostratul din siliciu  $R = \mu(\text{D/Si/D}) / \mu(\text{Si slab})$  ca funcție de temperatură. La temperaturi joase mobilitatea poate fi majorată de 4 – 10 ori în dependență de grosimea învelișului din diamant. Creșterea temperaturii slăbește efectul de amplificare a mobilității și la TC obținem  $R = 2 - 2,5$ . Densitatea stărilor fononice în nanostratul cu SEL este nulă doar pentru  $q=0$ . În nanostratul cu SEF, densitatea stărilor fononice este nulă într-un oarecare diapazon de energii mai mici decât energia ramurii

inferioare de oscilații ( $\sim 5$  meV în cazul straturilor cercetate). De aceea numărul de fononi, care participă în difuzie în nanostructurile cu SEF, este mai mic decât în nanostraturile cu SEL. Aceasta explică valorile mai înalte ale mobilității în nanostratul din siliciu cu SEF, mai ales la temperaturi joase.

#### **2.4. Concluzii la Capitolul 2**

Au fost cercetate teoretic proprietățile fononice și termice ale nanostructurilor bidimensionale pe bază de GaN și Si în cadrul a trei modele a stărilor fononice: a abordării continue și a modelelor dinamice a oscilațiilor rețelei cristaline „Face-centered cubic cell” și „Born-von Karman”. Stările de înveliș influențează puternic spectrul energetic al fononilor și conductibilitatea termică de rețea. Învelișurile cu o viteză a sunetului mai înaltă (mai joasă) decât în stratul interior, vor amplifica (atenua) fluxul de căldură în nanostructura multistrat comparativ cu monostratul fără înveliș. Acest efect se explică prin modificarea spectrului energetic al fononilor, apariția modelelor fononice hibride, prin modificarea vitezei de grup a fononilor și a densității stărilor fononice.

Mobilitatea electronilor în nanostructurile AlN/GaN/AlN poate fi majorată prin compensarea câmpului electric încorporat cu ajutorul unui câmp electric exterior ori prin crearea în centrul stratului de GaN a unui strat subțire de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  cu  $x \sim 0,05$ . Mobilitatea electronilor în nanostraturile din siliciu poate fi majorată prin acoperirea lor cu înveliș din material, care posedă o viteză a sunetului mai înaltă decât siliciul.

Abordarea descrisă a ingineriei fononice a conductibilității termice și a mobilității electronilor în nanostructurile 2D permite de a îmbunătăți proprietățile termice și termoelectrice ale nanostructurilor 2D într-un diapazon larg de temperaturi.



### 3. INGINERIA FONONICĂ ÎN NANOSTRUCTURILE SEMICONDUCTOARE UNIDIMENSIONALE

În acest capitol sunt descrise proprietățile fononice și termoconductibile ale nanostructurilor semiconductoare cvazi-unidimensionale – a nanofirelor în bază de semiconductori. În calitate de exemplu vor fi cercetate: (i) nanofirele cu secțiune transversală constantă din GaN, acoperite cu înveliș din AlN ori plastic; (ii) nanofirele cu secțiune transversală constantă și variabilă din siliciu, acoperite cu înveliș din Ge, SiO<sub>2</sub> ori plastic și (iii) – nanofirele segmentate Si/Ge, Si/SiO<sub>2</sub>, Si/Plastic. Rezultatele prezentate în acest Capitol sunt luate din lucrările originale ale autorului acestui Referat [9, 12, 13, 40, 125, 134, 135, 156].

#### 3.1. Ingineria spectrului energetic și vitezele de grup ale fononilor în nanofirele din GaN și Si, acoperite cu înveliș

##### 3.1.1. Abordarea continuă pentru fononi în nanofirele dreptunghiulare și cilindrice pe bază de GaN

În acest paragraf vom cerceta nanofirele dreptunghiulare din GaN cu rețea de tip „wurtzite”, acoperite cu înveliș (vezi Figura 3.1). În același timp, procedura de calcul descrisă este aplicabilă pentru orice combinații ale materialului nanofirului și materialului de înveliș. În continuare se presupune, ca axa cristalografică a materialului cu rețea de tip „wurtzite” este orientată de-a lungul axei  $X_3$ , iar axele de coordonate  $X_1$  și  $X_2$  sunt situate în planul secțiunii transversale a nanofirului paralel cu laturile ei. Centrul sistemului de coordonate este ales în centrul secțiunii transversale a nanofirului. Dimensiunile spațiale ale nanofirului interior sunt notate prin  $d_1^{(i)}$  și  $d_2^{(i)}$ , pe când dimensiunile totale sunt  $d_1$  și  $d_2$ . Dimensiunile spațiale ale nanofirelor s-au ales de câțiva nanometri pentru a asigura un confinament puternic al fononilor.

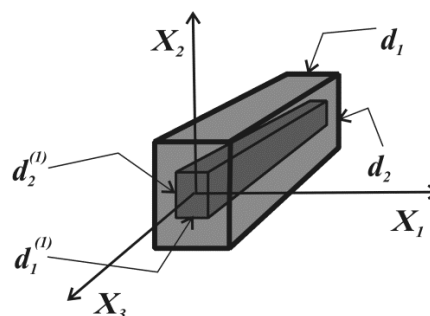


Fig. 3.1. Imaginea schematică a nanofirului dreptunghiular cu înveliș.

Deoarece sistemul cercetat este omogen de-a lungul axei  $X_3$  și neomogen în planul  $(X_1, X_2)$ , soluția Ecuației (2.1) se caută în forma:

$$U_i(x_1, x_2, x_3, t) = u_i(x_1, x_2) e^{i(\omega t - qx_3)}, \quad (i=1,2,3). \quad (3.1)$$

Substituind Ecuția (3.1) în Ecuția (2.1), obținem un sistem din trei ecuații față de componentele vectorului deplasării [12]:

$$\begin{aligned}
(c_{44}q^2 - \omega^2 \rho)u_1 &= c_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + c_{66} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial c_{11}}{\partial x_1} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial c_{66}}{\partial x_2} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + (c_{12} + c_{66}) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial c_{12}}{\partial x_1} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \\
&+ \frac{\partial c_{66}}{\partial x_2} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + q(c_{13} + c_{44}) \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + q \frac{\partial c_{13}}{\partial x_1} u_3, \\
(c_{44}q^2 - \omega^2 \rho)u_2 &= c_{66} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + c_{11} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial c_{66}}{\partial x_1} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial c_{11}}{\partial x_2} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + (c_{12} + c_{66}) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial c_{66}}{\partial x_1} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \\
&+ \frac{\partial c_{12}}{\partial x_2} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + q(c_{13} + c_{44}) \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + q \frac{\partial c_{13}}{\partial x_2} u_3, \\
(q^2 c_{33} - \omega^2 \rho) &= c_{44} \left( \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2} \right) + \frac{\partial c_{44}}{\partial x_1} \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial c_{44}}{\partial x_2} \frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \\
&- q(c_{13} + c_{44}) \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) - q \left( \frac{\partial c_{44}}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial c_{44}}{\partial x_2} u_2 \right).
\end{aligned} \tag{3.2}$$

La deducerea acestor ecuații a fost efectuată substituția  $u_3 = -iu'_3$ , după aceasta variabila  $u'_3$  a fost din nou redenumită în  $u_3$ :  $u'_3 \equiv u_3$ .

Structura cercetată posedă două planuri simetrice. Din invarianța sistemului de Ecuții (3.2) față de reflecția în aceste planuri, Ecuția (3.2) admite patru soluții diferite [12]. Aceste soluții se simbolizează ca modele „Dilatational (D)”, „Flexural<sub>1</sub> (F1)”, „Flexural<sub>2</sub> (F2)” și „Shear (Sh)” [12]:

$$\begin{aligned}
D : u_1^{AS}(x_1, x_2); u_2^{SA}(x_1, x_2); u_3^{SS}(x_1, x_2) &\rightarrow u_i^D; \\
F_1 : u_1^{SS}(x_1, x_2); u_2^{AA}(x_1, x_2); u_3^{AS}(x_1, x_2) &\rightarrow u_i^{F_1}; \\
F_2 : u_1^{AA}(x_1, x_2); u_2^{SS}(x_1, x_2); u_3^{SA}(x_1, x_2) &\rightarrow u_i^{F_2}; \\
Sh : u_1^{SA}(x_1, x_2); u_2^{AS}(x_1, x_2); u_3^{AA}(x_1, x_2) &\rightarrow u_i^{Sh}.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

În Ecuția (3.3) indicii SA și AS indică care modă este pară sau impară față de operația de schimbare a semnelui variabilei corespunzătoare:  $f(x_1, x_2) = -f(-x_1, x_2) = -f(x_1, -x_2) \rightarrow f^{AA}(x_1, x_2)$ , etc. Ecuțiile mișcării pentru nanofirele cilindrice au fost obținute în lucrările originale ale autorului acestui Referat [13].

În Figura 3.2 sunt prezentate dispersiile fononilor „dilatational” în nanofirul dreptunghiular din GaN fără înveliș, având dimensiunile secțiunii transversale de 4 nm x 6 nm (Figura 3.2 (a)), în nanofirul din GaN cu înveliș din AlN, având dimensiunile totale ale secțiunii transversale 4 nm x 6 nm și dimensiunile transversale ale nanofirului interior de 2 nm x 3 nm (Figura 3.2(b, d)) și în nanofirul din GaN cu înveliș din plastic, având dimensiunile secțiunii transversale totale de 4 nm x 6 nm și dimensiunile transversale ale nanofirului interior

de 2 nm x 3 nm (Figura 3.2(c)). Dispersiile fononice în Figura 3.2 (d) sunt construite pentru nanofirul cu suprafețe externe fixe. Celelalte grafice corespund nanofirelor cu suprafețe externe libere. În cazul SEF, moda fononică de tip volumetric lipsește în spectrul energetic și toate nivelele energetice ale fononilor sunt cuantificate dimensional. Din comparația Figurilor 3.2(b) și 3.2(d) rezultă, că modificarea condițiilor de frontieră de la SEL către SEF duce la majorarea energiei ramurilor fononice corespunzătoare pentru valori mici ale lui  $q$  și influențează slab partea spectrului energetic corespunzătoare energiilor mari. Acest lucru este legat de faptul, că poziția modelor fononice cu energie mare este determinată de parametrul  $1/a$ , în timp ce cuantificarea dimensională a fononilor cu energie joasă depinde de  $1/d$ .

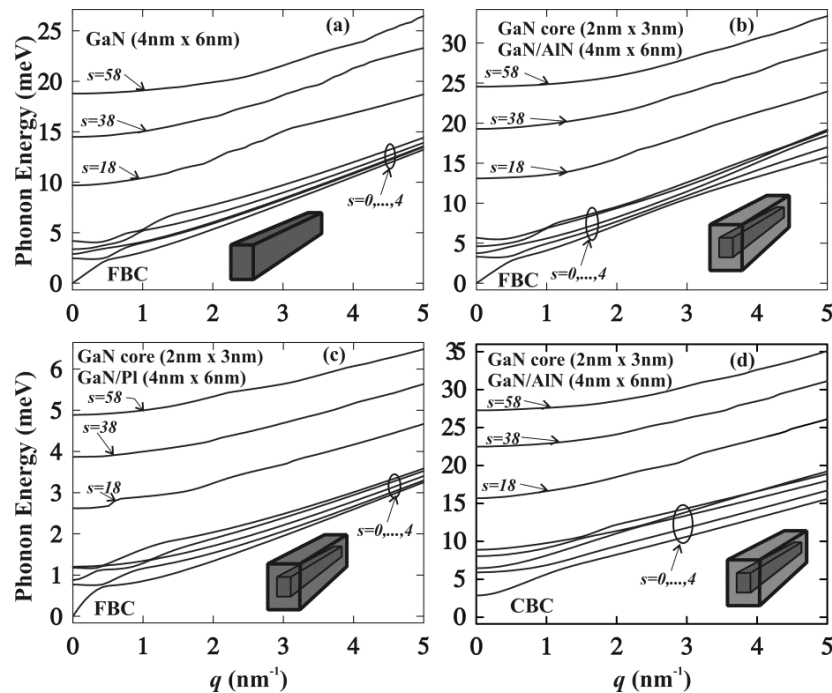


Fig. 3.2. Dispersia energiei modelor fononice „dilatational” în cazul suprafețelor exterioare libere (a–c) și fixe (d). Sunt prezentate rezultatele pentru (a) nanofurul de GaN cu dimensiunile 4 nm×6 nm; (b, d) – pentru nanofirul din GaN acoperit cu înveliș „acustic rapid” din AlN; (c) pentru nanofirul din GaN acoperit cu înveliș „acustic lent” din plastic. Dimensiunile totale ale secțiunii transversale a heterofirului sunt 4 nm×6 nm, iar dimensiunile secțiunii transversale a nanofirului interior din GaN - 2 nm×3 nm. Desenul a fost retipărit din publicația [9].

Influența învelișurilor asupra proprietăților fononice a nanofirelor se observă bine în Figurile 3.2 (b) și 3.2 (c). Învelișul mai puțin elastic și cu o viteză a sunetului mai joasă din plastic majorează densitatea ramurilor fononice pe o unitate de energie, în timp ce învelișul mai elastic și cu viteză a sunetului mai mare din AlN o micșorează. Energiile primelor 9 ramuri fononice pentru  $q=0$  se includ în intervalul energetic de 6 meV în cazul nanofirului din GaN fără înveliș

(vezi Figura 3.2 (a)). În nanofirul GaN/PI acest interval se micșorează până la 1,8 meV, iar în nanofirul GaN/AlN se majorează până la 7,5 meV (vezi Figurile 3.2(b) și 3.2(c)).

Viteza medie de grup a fononilor în funcție de frecvență are forma:

$$\bar{v}^{(\alpha)}(\omega) = \frac{S(\omega)}{\sum_s dq_s^{(\alpha)}(\omega)/d\omega}, \quad (3.4)$$

unde  $S(\omega)$  este numărul de ramuri fononice  $s$  cu frecvența  $\omega$ , iar sumarea se face după toate aceste ramuri. Dependența  $\bar{v}^{(\alpha)}$  de frecvență pentru diferite tipuri de mode fononice în nanofirele dreptunghiulare și cilindrice cu ori fără înveliș este prezentată în Figura 3.3. Vitezele de grup în nanofirele cu înveliș sunt arătate în acel diapazon energetic, în care poate fi aplicată abordarea continuă. Vitezele medii oscilează puternic din cauza numărului mare de ramuri fononice și a modificării puternice a derivatelor la modificarea frecvenței  $\omega$ .

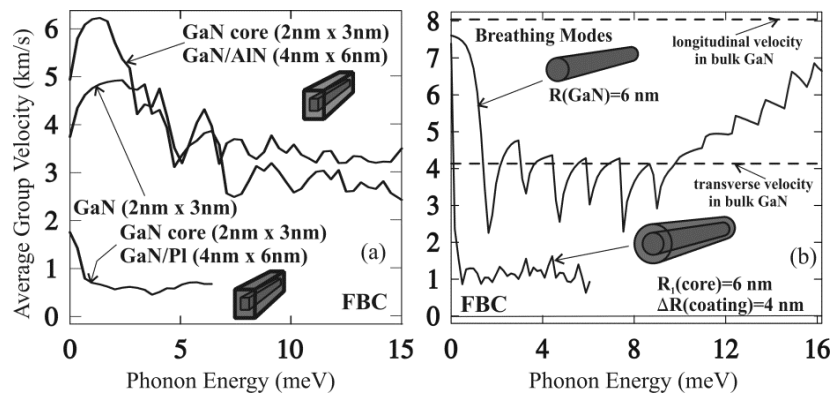


Fig. 3.3. Vitezele de grup medii ale fononilor în dependență de energia fononică (a) pentru modele „dilatational” în nanofirele dreptunghiulare din GaN, GaN/AlN și GaN/Plastic și (b) pentru modele „breathing” în nanofirele cilindrice din GaN și GaN/Plastic. Desenul a fost montat din publicația [9].

După cum observăm în Figura 3.3, învelișurile din plastic micșorează puternic viteza medie de grup a fononilor în nanofirele dreptunghiulare și cilindrice – de aproximativ 3 ori comparativ cu nanofirul fără înveliș. Învelișul din AlN din contra majorează viteza medie a fononilor de 1.3 ori.

### 3.1.2. Modelele dinamice ale oscilațiilor rețelei pentru nanofirele cu celulă elementară de tipul „diamant”

În nanofire vectorii de deplasare a atomilor (nodurilor în modelul FCC), care aparțin unei și aceleiași perioade de simetrie translațională, nu sunt echivalenți și, prin urmare, depind de coordonatele atomilor. Deplasările a celorlalți atomi (noduri) sunt echivalente deplasărilor din perioada aleasă ca urmare a simetriei de translație de-a lungul axei  $Z$ . În cazul nanofirului cu

secțiune transversală constantă perioada de translație constă dintr-un strat din atomi „albi” și un strat de atomi „negru” (straturile sunt perpendiculare pe axa Z). În cazul nanofirelor segmentate (SNW) și a nanofirelor cu secțiune transversală variabilă (MSNW), numărul straturilor atomare se determină de lungimea perioadei  $L$ . Imaginea schematică a nanofirelor este prezentată în Figura 3.4: nanofirul din Si cu secțiune constantă, având dimensiunile secțiunii transversale  $d_x \times d_y$  (Figura 3.4(a)), nanofirul segmentat Si/Ge cu dimensiunea segmentelor  $d_x \times d_y \times l_z^1$  și  $d_x \times d_y \times l_z^2$  (Figura 3.4(b)), nanofirul din siliciu cu secțiune variabilă având dimensiunea segmentelor  $d_x^1 \times d_y^1 \times l_z^1$  și  $d_x^2 \times d_y^2 \times l_z^2$  (Figura 3.4 (c)) și nanofirul segmentat Si/Ge cu secțiune variabilă, având dimensiunea segmentelor din siliciu  $d_x^1 \times d_y^1 \times l_z^1$  și  $d_x^2 \times d_y^2 \times l_z^2$ , acoperit cu înveliș din Ge având grosimea  $d_{Ge}$  (Figura 3.4 (d)).

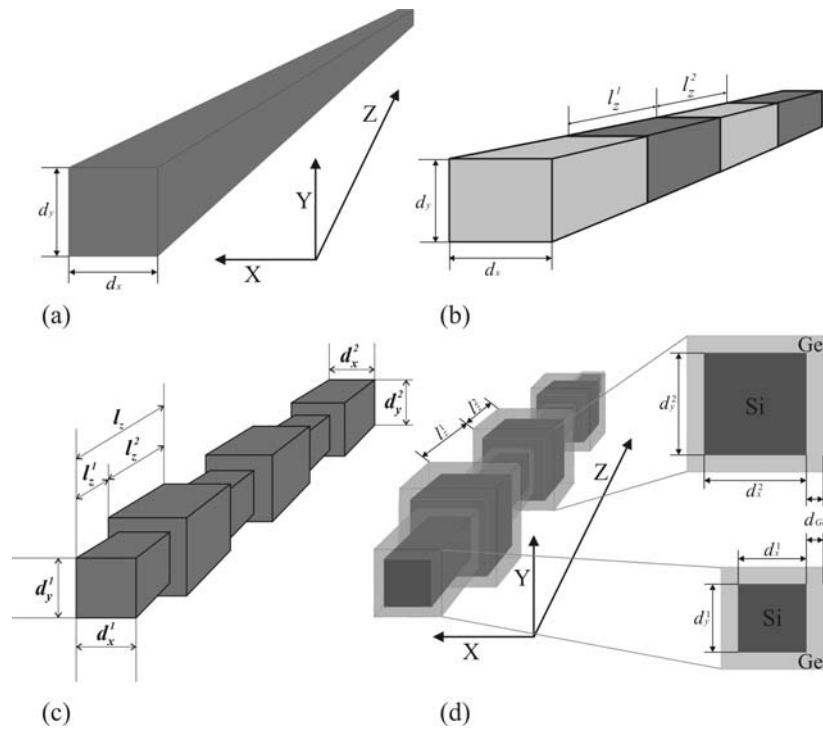


Fig. 3.4. Imaginea schematică a nanofirelor de siliciu (a), nanofirelor segmentate Si/Ge (b), nanofirelor cu secțiune transversală variabilă de Si (c) și de Si/Ge (d).

Deplasarea atomilor echivalenți se prezintă în forma:

$$\bar{u}(x, y, z + n \cdot L; q_z, t) = \bar{w}(x, y, z; q_z) e^{i(q_z n L - \omega t)}, \quad (3.5)$$

unde  $\bar{w}(x, y, z; q_z) \equiv \bar{w}(\vec{r}; q_z)$  – reprezintă amplitudinea deplasării atomului cu coordonatele  $x, y$  și  $z$ ; perioada este marcată prin-un număr întreg  $n$ , și  $q_z$  este vectorul de undă. Ecuațiile mișcării pentru amplitudinile vectorului de deplasare au forma:

$$\omega^2 w_i(\vec{r}_k; q_z) = \sum_{j=x,y,z; \vec{r}'_k} D_{ij}(\vec{r}_k, \vec{r}'_k) w_j(\vec{r}'_k; q_z), \quad k=1, \dots, N_a, \quad i = x, y, z, \quad (3.6)$$

unde  $N_a$  reprezintă numărul atomilor în perioada de translație a nanofirului.

În Figura 3.5 este prezentat spectrul energetic al fononilor „dilatational” în nanofirul din siliciu, având dimensiunile transversale  $37 \text{ ML} \times 37 \text{ ML}$  ( $1 \text{ ML} = a/4$ ) și în nanofirul segmentat Si/Ge cu aceeași secțiune transversală și cu 8 straturi atomare într-o perioadă (6 straturi atomare de siliciu și două straturi atomare de germaniu). Spectrul fononilor din Figura 3.5 a fost calculat în cadrul modelului FCC. Numărul total de ramuri fononice „dilatational” este egal cu 280 în Si NW și cu 1120 în Si/Ge SNW. În Figura 3.5 sunt prezentate ramurile fononice  $\hbar\omega_s(q_z)$  cu numerele  $s = 0, 1, \dots, 4, 10, 20, 30, \dots, 100, 200, 300, \dots, 1100$ .

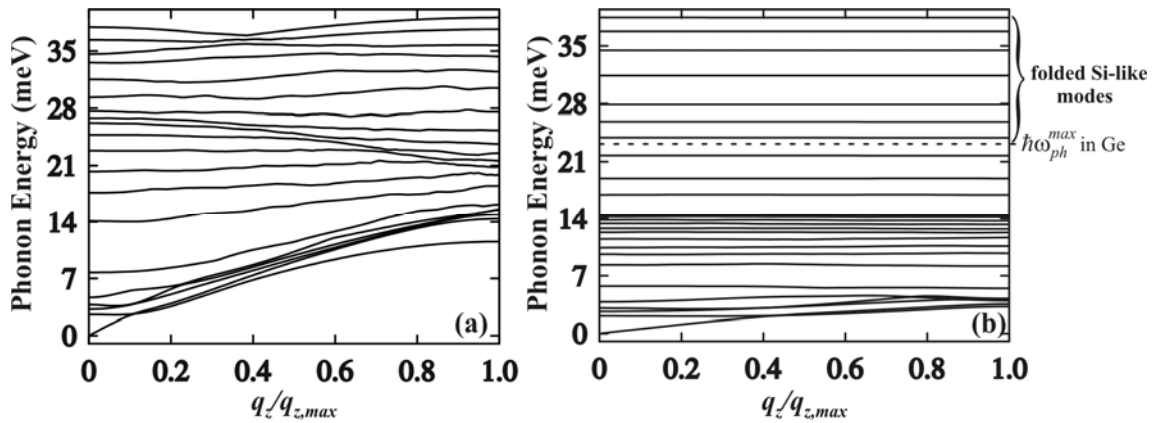


Fig. 3.5. Energiile fononilor „Dilatational” în dependență de numărul de undă  $q$  în (a) nanofirul omogen din siliciu cu secțiunea transversală  $37 \text{ ML} \times 37 \text{ ML}$ . Sunt prezentate ramurile fononice cu  $s = 0, 1, 2, 3, 4, 10, 30, 50, \dots, 280$ ; (b) în nanofirul segmentat Si/Ge cu aceeași secțiune transversală și cu 8 straturi atomare în perioadă (2 straturi atomare de germaniu și 6 straturi atomare de siliciu). Sunt prezentate ramurile fononice cu  $s=0, 1, 2, 3, 4, 10, 30, 50, \dots, 190, 200, 300, \dots, 1100, 1120$ . Desenul a fost retipărit din publicația [40] cu permisiunea “American Physical Society”.

Linia întreruptă din Figura 3.5 (b) indică energia maximală a fononilor în nanofirul din Ge. Frecvența maximală a fononilor în siliciu este mai mare decât în germaniu, de aceea modele fononice „Si-like” cu frecvență înaltă în Si/Ge SNW se dovedesc a fi captate în segmentele din siliciu și nu se propagă în interiorul segmentelor din germaniu. Aceste mode nu vor participa în transportul de căldură, de aceea nanofirul segmentat Si/Ge se prezintă ca un *filtru fononic*, care îndepărtează multe mode fononice din transportul de căldură [40]. Din Figura 3.5 rezultă faptul, ca vitezele modelor fononice cu  $\hbar\omega > 7 \text{ meV}$  nu sunt nule în nanofirul din siliciu și sunt practic nule în Si/Ge SNW #1. Efectul analogic de captare a modelor fononice a fost depistat de asemenea în nanofirele cu secțiune variabilă din siliciu și în Si/Ge MSNW [134-135].

Efectul încetirii fononice în nanofirele segmentate (NS) și nanofirele cu secțiune transversală variabilă (NSTV) este ilustrat în Figura 3.6, unde este arătată dependența de energia fononilor a vitezei medii de grup. Viteza medie de grup a fononilor în NS și NSTV este mai mică decât în NF din siliciu. Micșorarea vitezei de grup se explică prin efectul de captare a modelor fononice în segmentele NS/NSTV.

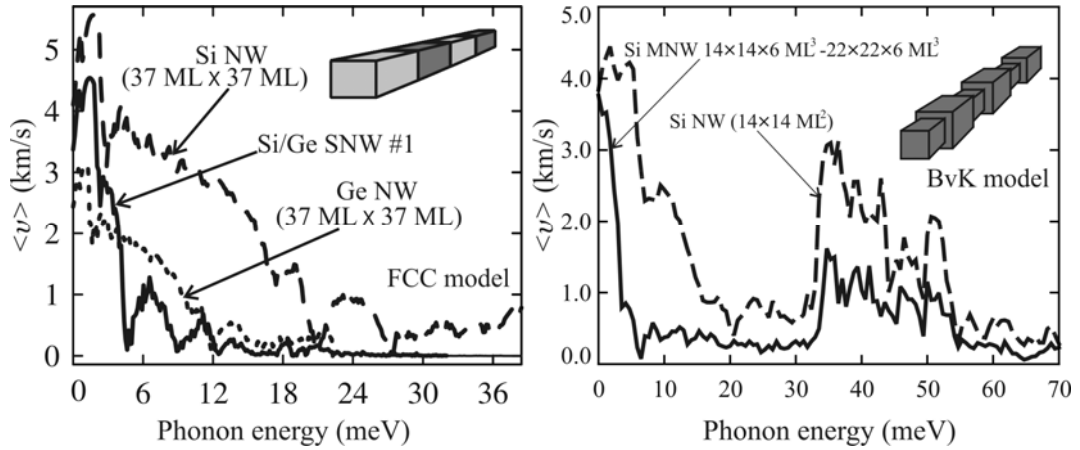


Fig. 3.6. (a) Vitezele de grup medii ale fononilor în dependență de energia fononică în nanofirele omogene din Si și Ge cu dimensiunile secțiunii transversale 37 ML  $\times$  37 ML, cât și în nanofirul segmentat Si/Ge cu aceeași secțiune transversală și cu 8 straturi atomare în perioadă (2 straturi atomare de germaniu și 6 straturi atomare de siliciu). (b) Vitezele de grup medii ale fononilor în dependență de energia fononilor în nanofirul omogen din siliciu cu secțiunea transversală 14 ML  $\times$  14 ML și în nanofirul din siliciu cu secțiune transversală variabilă, având dimensiunile 14 ML  $\times$  14 ML  $\times$  6 ML/ 22 ML  $\times$  22 ML  $\times$  6 ML. Desenul a fost montat din publicațiile [40, 134] cu permisiunea “American Physical Society”.

### 3.2. Ingineria fononică a conductibilității termice în nanofirele pe bază de siliciu

Conductibilitatea termică a nanofirelor poate fi obținută din Ecuația (2.22), ținând cont de densitatea unidimensională a stărilor fononice. Trecând în Ecuația (2.22) de la operația de sumare la operația de integrare, se poate de obținut următoarea formulă [134, 135]:

$$\kappa_{\text{MSNW}} = (l_z^1 + l_z^2) \cdot \Theta \cdot [(d_x^1 + 2d_{\text{shell}}^1) \cdot (d_y^1 + 2d_{\text{shell}}^1) \cdot l_z^1 + (d_x^2 + 2d_{\text{shell}}^2) \cdot (d_y^2 + 2d_{\text{shell}}^2) \cdot l_z^2]^{-1} \quad (3.7)$$

În cazul nanofirelor segmentate cu secțiune transversală variabilă fără înveliș  $d_{\text{shell}} = 0$  și Ecuația (3.7) poate fi scrisă în forma:

$$\kappa_{\text{MSNW}}^{\text{homogeneous}} = \frac{l_z^1 + l_z^2}{d_x^1 d_y^1 l_z^1 + d_x^2 d_y^2 l_z^2} \cdot \Theta. \quad (3.8)$$

În cazul nanofirelor omogene sau a nanofirelor segmentate cu secțiune constantă:  $d_{\text{shell}} = 0$ ,  $d_x^1 = d_x^2 = d_x$  și  $d_y^1 = d_y^2 = d_y$ , de aceea Ecuația (3.7) capătă forma:

$$\kappa_{SNW} = \frac{\Theta}{d_x d_y}; \kappa_{NW} = \frac{\Theta}{d_x d_y}. \quad (3.9)$$

În Ecuțiile (3.7-3.9)  $\Theta$  reprezintă fluxul de căldură care revine la o unitate a gradientului de temperatură (în continuare – flux termic) [134, 135]:

$$\Theta = \frac{1}{2\pi k_B T^2} \sum_{s=1, \dots, 3N} \int_0^{q_{z, \max}} \left[ (\hbar \omega_s(q_z) v_{z,s}(q_z))^2 \times \tau_{tot,s}(q_z) \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} \right] dq_z. \quad (3.10)$$

Din Ecuțiile (3.7-3.10) rezultă, că fluxul de căldură/conductibilitatea termică depind puternic de spectrul energetic al fononilor: modificând energia fononilor putem modifica transportul de căldură.

În nanofirele din siliciu și germaniu principalele mecanisme de împrăștiere sunt: difuzia 3-fonică Umklapp și împrăștierea pe suprafață [25, 150-155]. Conform regulii Matthiessen, perioada totală de difuzie a fononilor are forma:  $1/\tau_{tot,s}(q_z) = 1/\tau_{B,s}(q_z) + 1/\tau_{U,s}(q_z)$ , unde  $\tau_{B,s}$  este perioada difuziei superficiale, iar  $\tau_{U,s}$  – perioada de difuzie în procesele Umklapp. În formă explicită formulele pentru perioada de difuzie a fononilor, cât și calculul detaliat al conductibilității termice sunt prezentate în lucrările originale ale autorului acestui Referat [40, 134-135, 156].

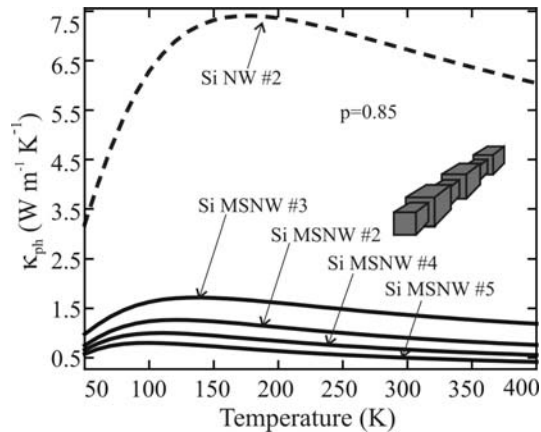


Fig. 3.7. Dependența de temperatură a conductibilității termice de rețea pentru nanofirul omogen din siliciu cu dimensiunile secțiunii transversale  $14 \text{ ML} \times 14 \text{ ML}$  și pentru nanofirele din siliciu cu secțiune transversal variabilă, având diferite dimensiuni. Desenul a fost retipărit din publicația [134] cu permisiunea “American Physical Society”.

În Figura 3.7 este prezentată dependența de temperatură a conductibilității termice în nanofirul din siliciu (Si NW#2) și în nanofirele din siliciu cu secțiune transversală variabilă: Si



MSNW #2 (14×14×8 ML/22×22×8 ML), Si MSNW #3 (14×14×8 ML/18×18×8 ML), Si MSNW #4 (14×14×8 ML/26×26×8 ML) și Si MSNW #5 (14×14×8 ML/30×30×8 ML). Rezultatele au fost obținute pentru o valoare rezonabilă a parametrului de împrăștiere superficială  $p = 0.85$ , obținută în [37] la compararea conductibilităților termice teoretică și experimentală în nanostratul din Si cu grosimea de 20 nm. Modificarea puternică a spectrului fononic și micșorarea vitezei medii de grup a fononilor în nanofirele cu secțiune transversală variabilă duc la micșorarea semnificativă a conductibilității termice de rețea. La temperatura camerei raportul conductibilităților termice în nanofirul cu secțiune variabilă și în nanofirul cu secțiune constantă posedă valori situate în diapazonul 5 – 13 ori în dependență de dimensiunea secțiunii transversale  $S_2 = d_x^2 \times d_y^2$ .

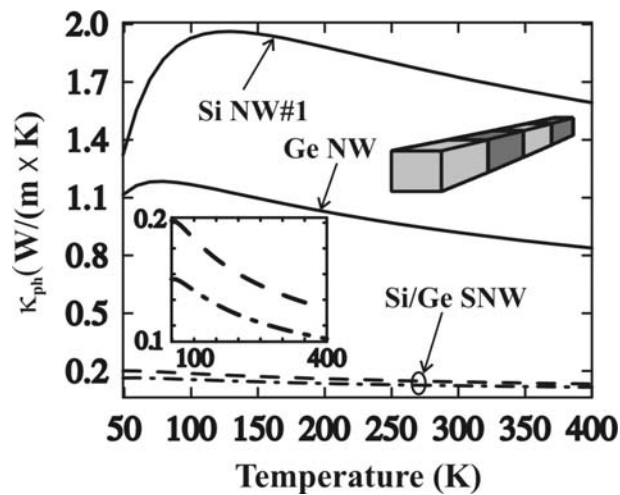


Fig. 3.8. Dependența de temperatură a conductibilității termice de rețea pentru nanofirele omogene din Si și Ge (liniile continui), pentru nanofirul segmentat Si/Ge cu 12 monostraturi de siliciu și 4 monostraturi de germaniu în perioadă (linia întreruptă) și cu 8 monostraturi de siliciu și 8 monostraturi de germaniu în perioadă (linia din segmente și puncte). Desenul a fost retipărit din publicația [40] cu permisiunea “American Physical Society”.

În Figura 3.8 este prezentată dependența de temperatură a conductibilității termice fononice pentru nanofirele segmentate Si/Ge cu secțiunea transversală 37 ML x 37 ML și lungimi diferite ale segmentelor de-a lungul axei firului. În intervalul termic 150 – 300 K conductibilitatea termică în nanofirul segmentat este de 5 – 6 ori mai mică decât în nanofirul din Ge și de 9 – 11 ori mai mică decât în nanofirul din Si. Când numărul straturilor atomare de siliciu în perioadă crește de la 8 la 12, conductibilitatea termică crește puțin. De aceea o conductibilitate termică minimală o posedă nanofirul segmentat cu același număr de straturi atomare de siliciu și germaniu în perioadă. În lucrarea [157] a fost demonstrat teoretic, că conductibilitatea termică a nanofirului segmentat, care constă din diferiți izotopi de siliciu, este de 2 ori mai mică decât a

nanofirului omogen. Rezultatele descrise pentru nanofirele segmentate Si/Ge demonstrează o micșorare și mai semnificativă a conductibilității termice datorită localizării mai puternice a unei părți din modele fononice în segmentele nanofirului. Rezultatele obținute se află într-un acord calitativ cu micșorarea conductibilității termice de rețea, prezisă pentru nanofirele segmentate cilindrice Si/Ge, având diametrul mai mic de 15 nm [158]. O conductibilitate termică mai mică de  $1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  la TC a fost de asemenea obținută în suprarețelele multistratificate, formate din punctele cuantice Si/Ge [159].

### **3.3. Concluzii la Capitolul 3**

Au fost cercetate teoretic proprietățile fononice și termice ale nanofirelor în bază de GaN și Si în cadrul a trei modele pentru fononi: a abordării continue și a modelelor dinamice a oscilațiilor rețelei cristaline „Face-centered Cubic Cell” și „Born-von Kaan”. Învelișurile nanofirelor cu o viteză a sunetului mai mică decât în nanofir, comprimă spectrul energetic al fononilor și micșorează atât viteza de grup a fononilor, cât și conductibilitatea termică de rețea. Învelișurile cu o viteză a sunetului mai înaltă demonstrează un efect invers. Explicarea fizică a micșorării/majorării vitezei fononilor și a conductibilității termice ține de redistribuirea deformațiilor elastice în nanofirele cu înveliș.

O mare parte din modele fononice în nanofirele segmentate și în nanofirele cu secțiune transversală variabilă din siliciu nu participă în transportul de căldură din cauza captării lor în segmentele nanofirului. De aceea fluxul termic în astfel de nanofire poate fi micșorat cu aproximativ 3 ordine de mărime comparativ cu siliciul volumetric și cu 1 ordin – comparativ cu nanofirul omogen din siliciu.

Rezultatele descrise indică faptul, că segmentarea și modularea secțiunii transversale sunt mijloace eficiente de inginerie fononică în nanofire în scopul îmbunătățirii proprietăților termoconductibile ale lor.

## 4. INGINERIA FONONICĂ ÎN GRAFEN

În acest capitol sunt descrise rezultatele teoretice, obținute la modelarea proprietăților fononice și termice ale grafenului și a grafenului multistrat; se discută două abordări, utilizate la cercetarea conductibilității termice în grafen și specificul transportului de căldură 2D. Rezultatele prezentate în acest capitol au fost publicate în lucrările originale ale autorului Referatului, consacrate diferitor aspecte ale proprietăților fononice și termice ale grafenului și grafenului multistrat [6, 29, 49, 54, 56-58, 95, 125, 160, 161].

### 4.1. Fononii în grafen

Rețeaua cristalină a grafenului monostrat (GM ori SLG) este prezentată în Figura 4.1 (a). Celula elementară în formă de romb (regiunea hășurată în Figura 4.1(a)) este determinată de doi vectori bazici  $\vec{a}_1 = a(3, \sqrt{3})/2$ , și  $\vec{a}_2 = a(3, -\sqrt{3})/2$ , unde  $a = 0.142$  nm este distanța dintre atomii cei mai apropiați de carbon. Atomii „albi” și „negri” semnifică atomii primei și celei de-a doua subrețele Bravais, corespunzător. Atomul  $1_0$  al primei subrețele Bravais este înconjurat de trei atomi  $(\bar{1}_0, \bar{2}, \bar{3})$  ai celei de a doua subrețele. Circumferințele indică prima și cea de-a doua sferă de influență pentru atomul  $1_0$ . În prima sferă avem trei atomi din a doua subrețea cu razele – vectoare  $\vec{R}[\bar{1}_0; 1_0] = a(1, 0)$  și  $\vec{R}[\bar{2}(\bar{3}); 1_0] = a(-1, \pm\sqrt{3})/2$ . În a doua sferă sunt prezenți șase atomi ai primei subrețele cu razele vectoare  $\vec{R}[1(4); 1_0] = \pm a(0, \sqrt{3})$ ,  $\vec{R}[2(5); 1_0] = \pm a(-3, \sqrt{3})/2$  și  $\vec{R}[3, (6); 1_0] = \pm a(3, \sqrt{3})/2$ .

Celula elementară a grafenului monostrat conține doi atomi (vezi Figura 4.1 (a)), de aceea în grafen există șase ramuri fononice: (i) ramurile „out-of-plane” acustică (ZA) și optică (ZO) cu vectorul deplasării orientat perpendicular planului stratului; (ii) ramurile transversale acustică (TA) și optică (TO), care corespund oscilațiilor transversale în planul stratului și (iii) ramurile longitudinale acustică (LA) și optică (LO), care corespund oscilațiilor longitudinale în planul stratului. Calculul spectrului energetic al fononilor a fost efectuat în cadrul modelelor dinamice a oscilațiilor rețelei cristaline „Valence Force Field” și „Born-von Karman”. Descrierea detaliată a acestor modele și a procedurii de calcul sunt prezentate în lucrările autorului [6, 49, 58, 160, 161]. În Figura 4.1 (b) sunt prezentate dispersiile fononilor în GM, calculate în cadrul modelului „VFF”. Energiile fononilor se află într-un acord perfect atât cu rezultatele altor lucrări teoretice, cât și cu rezultatele experimentale [4, 5, 162].

Celula elementară a grafenului  $n$ -stratificat cu ordinea de succesiune a straturilor atomare de tipul „Bernal” conține  $2n$  atomii în celula elementară, de aceea în grafenul  $n$ -stratificat sunt

prezente  $6n$  ramuri fononice. Dispersiile fononice, calculate în cadrul modelului „VFF”, sunt prezentate în Figura 4.2. Interacțiunea slabă dintre straturi de tip van der Waals se manifestă doar în spectrul fononilor cu lungime de undă mare pentru  $q < 0.1q_{max}$  în cazul fononilor LA, TA, LO, TO și ZO și pentru  $q < 0.4q_{max}$  în cazul fononilor ZA (vezi Figura 4.2 (b)). Modificarea spectrului fononic în grafenul  $n$  – stratificat comparativ cu spectrul grafenului monostrat duce la amplificarea difuziei 3-fononice și la micșorarea conductibilității termice de rețea în grafenul  $n$ -stratificat [6, 29, 54, 66-67, 95].

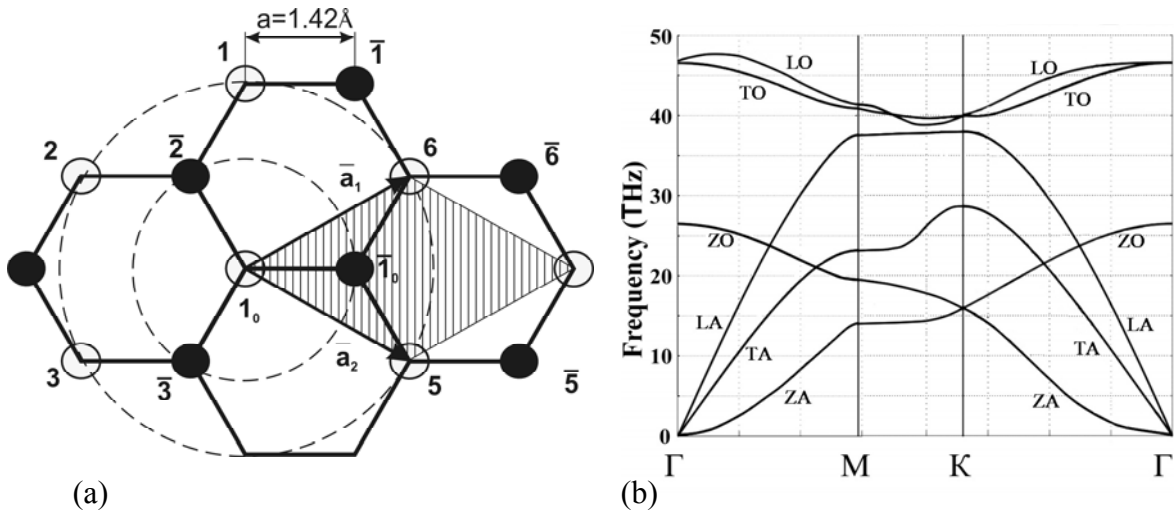


Fig. 4.1. (a) Rețeaua cristalină a grafenului. Rombul hășurat indică celula elementară. (b) Dispersiile fononice în grafen, calculate în cadrul modelului „Valence Force Field”. Desenul a fost montat din publicația [6] cu permisiunea “American Physical Society”.

În ultimul timp a crescut interesul față de cercetarea proprietăților fizice ale grafenului multistratificat „twisted”. Atunci când atomii de carbon se suprapun unul peste altul, se pot forma uzoarele Moire [163-165]. În cazul grafenului bistratificat acest lucru se manifestă prin rotația unui monostrat în raport cu celălalt sub un unghi oarecare. Exemple de uzoare Moire în grafenul bistratificat sunt prezentate în Figura 4.3. Grafenul multistrat „twisted” se obține experimental din fază gazoasă și stratificare ori creștere mecanică pe substrat de SiC [140, 164-167]. Cu toate că rotația unui strat față de celălalt influențează interacțiunea slabă dintre straturi, ea încalcă simetria de succesiune a straturilor și duce la o dependență neobișnuită a proprietăților electronice și fononice de unghiul de rotație.

În Figura 4.4 sunt prezentate dispersiile fononilor de-a lungul direcției  $\Gamma$ - $K$  a zonei Brillouin în grafenul monostrat, grafenul bistratificat „AA-stacked” (AA-BLG), grafenul bistratificat „AB-stacked” (AB-BLG) și în grafenul bistrat „twisted” (T-BLG) cu unghiul de rotație dintre straturi  $\theta = 21.8^\circ$  și  $\theta = 13.7^\circ$ . Frecvențele fononilor au fost calculate în cadrul modelului „BvK” al

oscilațiilor rețelei cristaline pentru fiecare număr de undă  $q$  din intervalul  $[0, q_{\max}(\theta)]$ , unde  $q_{\max}(\theta)$  se determină conform formulei:

$$q_{\max}(\theta) = 2q_{\max}(\theta = 0) \sin(\theta/2) = 8\pi \sin(\theta/2)/(3\sqrt{3}a). \quad (4.1)$$

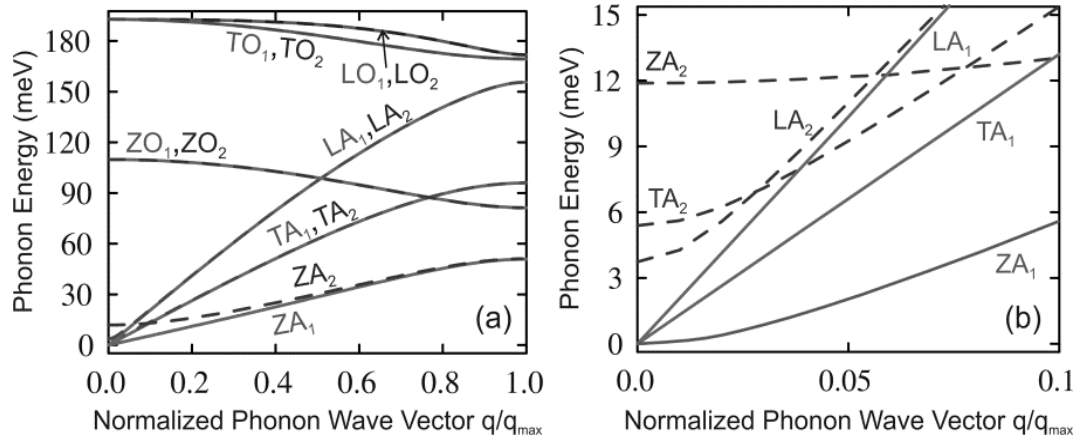


Fig. 4.2. Dispersiile fononice în grafenul bistrat, calculate în cadrul modelului „VFF”. Desenul a fost retipărit din publicația [54] cu permisiunea “Nature Publishing Group”.

Direcțiile în zona Brillouin pentru grafenul „twisted” depind mult de unghiul de rotație dintre straturi și nu coincid cu direcțiile în zona Brillouin ale grafenului monostrat ori a grafenului bistrat AA/AB. De aceea dispersiile fononice în Figura 4.4 corespund unor direcții diferite. Însă punctele  $\Gamma$  și  $K$  ale zonei Brillouin în grafenul „twisted” coincid cu punctele  $\Gamma$  și  $K$  ale grafenului bistrat AB/AA, de aceea modificarea modele fononice în aceste puncte este o consecință directă a rotației straturilor unui în raport cu celălalt.

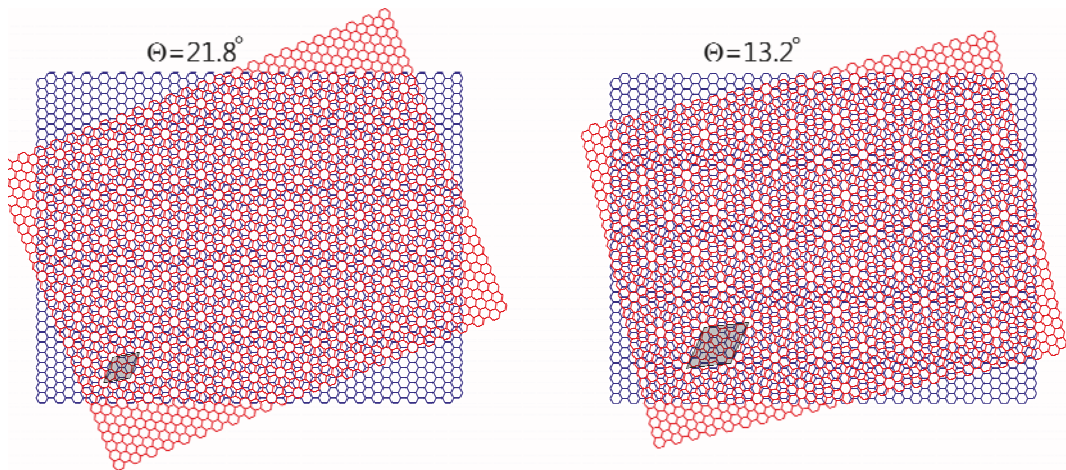


Fig. 4.3. Uzoarele Moire în grafenul bistrat „twisted”.

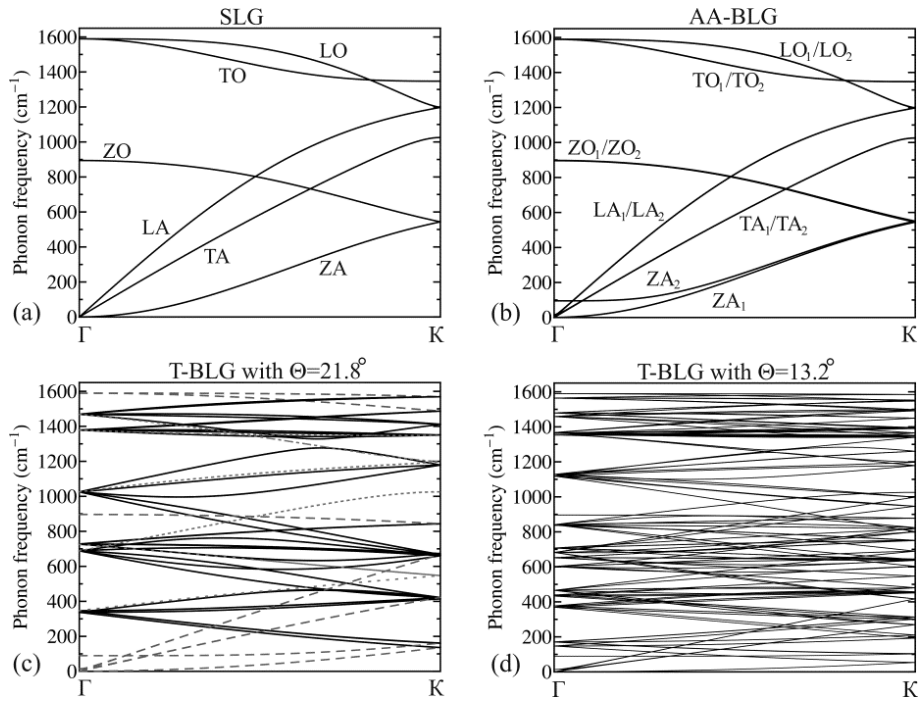


Fig. 4.4. Dispersiile fononice în grafenul monostrat (a), grafenul bistrat „AA-stacked” (b) și în grafenul bistrat „twisted” cu  $\theta = 21.8^\circ$  (c) și  $\theta = 13.2^\circ$  (d). Dispersiile sunt prezentate pentru direcția  $\Gamma - K$  în zona Brillouin a GM, GB și GB, corespunzător. Figura este retipărită din publicația [58] cu permisiunea “American Physical Society”.

Șase perechi de ramuri fononice în grafenul bistrat AA-BLG ori AB-BLG:  $LA_1/LA_2$ ,  $TA_1/TA_2$ ,  $ZA_1/ZA_2$ ,  $LO_1/LO_2$ ,  $TO_1/TO_2$  și  $ZO_1/ZO_2$  reprezintă analogii ramurilor LA, TA, ZA, LO, TO și ZO în SLG. Diferența  $\Delta$  dintre energiile ramurilor în perechi este mică din cauza interacțiunii slabe dintre straturi și atinge valoare maximală  $\Delta_{\max}$  în centrul zonei Brillouin:  $\Delta_{\max}(LA) = \Delta_{\max}(TA) = 13.4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\Delta_{\max}(ZA) = 95 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\Delta_{\max}(LO) = \Delta_{\max}(TO) = 0.1 \text{ cm}^{-1}$  și  $\Delta_{\max}(ZO) = 1.5 \text{ cm}^{-1}$ .

Interacțiunea covalentă dintre atomii de carbon în interiorul straturilor este mult mai puternică decât interacțiunea de tip van der Waals dintre straturi. De aceea diferența în frecvența fononilor în BLG și SLG este foarte mică (exceptând ramura fononică  $ZA_2$ ). Rezultate analogice au fost obținute pentru SLG și BLG în cadrul teoriei funcției de densitate [168] a modelului „VFF” [54, 95] și în modelele, care utilizează potențialele optimizate Tersoff și Lennard-Jones [66]. Este important de a menționa faptul, că deși modelele diferite prezic diferite energii ale fononilor în punctul  $\Gamma$  [6, 11, 29, 54, 85, 95, 168, 169], ele toate într-un acord bun prezic comportamentul modelor fononice și mersul curbelor dispersiei fononice.

Rotația unui strat față de altul influențează dispersiile fononilor datorită modificării pozițiilor reciproce a atomilor unui strat față de celălalt strat. Această modificare, la rândul său, schimbă

atât interacțiunea slabă de tip van der Waals dintre straturi, cât și dimensiunea celulei elementare. În rezultat, în grafenul „twisted” apar modele fononice *hibride* „*folded*” ca urmare a amestecării modelor fononice din diferite direcții în zona Brillouin ale grafenului obișnuit AA sau a grafenului „twisted” AB.

#### 4.2. Conductibilitatea termică de rețea a grafenului

În acest paragraf va fi precăutat detaliat specificul transportului fononic în structurile 2D. Cercetarea conductibilității termice în grafen [47, 48] și în nanotuburile din carbon [170] au ridicat problema determinării conductibilității termice proprii a rețelelor cristaline 2D și 1D. S-a stabilit faptul, că în cristalele anarmonice 3D conductibilitatea termică proprie, adică conductibilitatea, limitată doar de împrăștierea anarmonică a fononilor, este o mărime finită. În același timp unele modele teoretice prezic divergența conductibilității termice proprii în sistemele 2D ideale, ca  $\kappa \sim \ln(N)$ , cât și în sistemele 1D ideale, unde  $\kappa \sim N^\alpha$ ,  $N$  este numărul atomilor, iar  $0 < \alpha < 1$  [171-173]. Divergența logaritmică poate fi exclusă prin introducerea mecanismelor suplimentare „*extrinseci*” de împrăștiere a fononilor, cum ar fi împrăștierea pe defectele punctiforme ori pe frontierele structurii [57]. Astfel, conductibilitatea termică proprie a cristalului 2D poate fi stabilită doar pentru cristalul cu dimensiuni concrete.

Grafenul nu este un cristal 2D ideal, deoarece atomii lui se mișcă în trei direcții. Însă conductibilitatea termică proprie a grafenului depinde mult de dimensiunile spațiale ale stratului din cauza împrăștierii slabe a fononilor cu lungime de undă mare. De aceea împrăștierea fononilor pe frontierele stratului este un mecanism de împrăștiere important pentru grafen. Cercetările au arătat de asemenea [57, 174, 175], că luarea în calcul a proceselor anarmonice de rang mai superior (mai superior decât difuzia 3-fononică Umklapp), cât și a proceselor normale, permit, în mod firesc, de a limita lungimea parcursului liber al fononilor cu lungime de undă mare. Însă și în aceste cercetări doar straturile suficient de mari ( $> 10 \mu\text{m}$ ) demonstrează o conductibilitate termică, care nu depinde de dimensiuni.

Conductibilitatea termică de rețea a sistemului cvasi-2D, obținută din ecuația Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare, poate fi scrisă în forma [6, 57]:

$$\kappa_G = \frac{1}{4\pi k_B T^2 h} \sum_s \int_0^{q_{\max}} \left\{ \left[ \hbar \omega_s(q) \frac{d\omega_s(q)}{dq} \right]^2 \tau_{\text{tot}}(s, q) \frac{\exp[\hbar \omega_s(q) / k_B T]}{[\exp[\hbar \omega_s(q) / k_B T] - 1]^2} q \right\} dq. \quad (4.2)$$

unde  $h = 0.335 \text{ nm}$  reprezintă grosimea stratului de grafen, iar sumarea se face după toate ramurile fononice  $s$ .

Specificul transportului fononic poate fi ilustrat cu ajutorul formulei analitice pentru conductibilitatea termică de rețea, deduse în [49]. Expresia standard pentru perioada de relaxare

a fononilor în procesele Umklapp [90, 92] permite de a separa perioadele de difuzie a fononilor  $LA$  și  $TA$ :

$$\tau_{U,s} = \frac{1}{\gamma_s^2} \frac{M v_s^2}{k_B T} \frac{\omega_{s,\max}}{\omega^2}, \quad (4.3)$$

unde  $s=TA, LA$ ,  $v_s$  este viteza medie de grup a ramurii fononice corespunzătoare, iar  $M$  – masa celulei elementare. Parametrul mediu al anarmonicității – parametrul Grunaizen  $\gamma_s$ , a fost calculat prin medierea după  $q$  a dependenței  $\gamma_s(q)$ , obținute în lucrarea [5].

Pentru simplificarea modelului vom presupune, că legea de dispersie a fononilor este una liniară:  $\omega_s(q) = v_s q$ . În acest caz Ecuația (4.2) poate fi scrisă în forma:

$$\kappa_U = \frac{M}{4\pi Th} \sum_{s=TA,LA} \frac{\omega_{s,\max} v_s^2}{\gamma_s^2} F(\omega_{s,\min}, \omega_{s,\max}), \quad (4.4)$$

unde

$$F(\omega_{s,\min}, \omega_{s,\max}) = \int_{\hbar\omega_{s,\min}/k_B T}^{\hbar\omega_{s,\max}/k_B T} x \frac{\exp(x)}{[\exp(x)-1]^2} dx = [\ln\{\exp(x)-1\} + \frac{x}{1-\exp(x)} - x] \Big|_{\hbar\omega_{s,\min}/k_B T}^{\hbar\omega_{s,\max}/k_B T}. \quad (4.5)$$

În Ecuația (4.5) avem  $x = \hbar\omega/k_B T$ , iar frecvența  $\omega_{s,\max}$  se determină din spectrul real al fononilor. Frecvența  $\omega_{s,\min}$  pentru fiecare ramură fononică se determină din condiția, că lungimea parcursului liber mediu nu trebuie să depășească dimensiunea reală  $L$  a mostrei, adică:

$$\omega_{s,\min} = \frac{v_s}{\gamma_s} \sqrt{\frac{M v_s}{k_B T} \frac{\omega_{s,\max}}{L}}. \quad (4.6)$$

Integrala din Ecuația (4.5) poate fi simplificată și mai mult la temperaturi apropiate de temperatura camerei, când  $\hbar\omega_{s,\max} > k_B T$ :

$$F(\omega_{s,\min}) \approx -\ln\{|\exp(\hbar\omega_{s,\min}/k_B T) - 1|\} + \frac{\hbar\omega_{s,\min}}{k_B T} \frac{\exp(\hbar\omega_{s,\min}/k_B T)}{\exp(\hbar\omega_{s,\min}/k_B T) - 1} \quad (4.7)$$

Ecuațiile (4.4) și (4.7) obținute reprezintă modelul analitic simplificat de calculare a conductibilității termice fononice în grafen. În același timp, acest model ține cont de deosebirea dintre fononii  $LA$  și  $TA$ , el de asemenea reflectă natura bidimensională a transportului fononic în grafen până la frecvența fononică nulă. Ecuația (4.4) trece în formula Klemens pentru grafen [90] dacă se presupune egalitatea parametrilor ramurilor  $LA$  și  $TA$  și ale populării tuturor modelelor fononice (limitele  $x \rightarrow 0$ ,  $\hbar\omega \ll k_B T$ ).

În Figura 4.5 este ilustrată dependența conductibilității termice de rețea a grafenului de dimensiunea medie  $L$  a stratului în cazul diferitor combinații de parametri Gruneisen. Valorile  $\gamma_{LA}=1.8$  și  $\gamma_{TA}=0.75$  au fost obținute la medierea dependenței  $\gamma_s(q)$  din [5]. În cazul straturilor



mici de grafen, conductibilitatea termică depinde destul de puternic de  $L$ . Rezultatele teoretice se acordă bine cu valorile experimentale privind conductibilitatea termică, prezentate în lucrările [47, 48, 50, 51]. Linia întreruptă orizontală indică conductibilitatea termică a grafitului volumetric, care începe să depășească conductibilitatea termică a grafenului în cazul valorilor mici ale lui  $L$ . Conductibilitatea termică crește odată cu creșterea lui  $L$  datorită dependenței  $\omega_{s,\min} \sim L^{-1/2}$  (vezi Ecuația (4.6)). Acest lucru denotă faptul, că în straturile mari fononii cu lungime de undă mare pot participa în transportul de căldură.

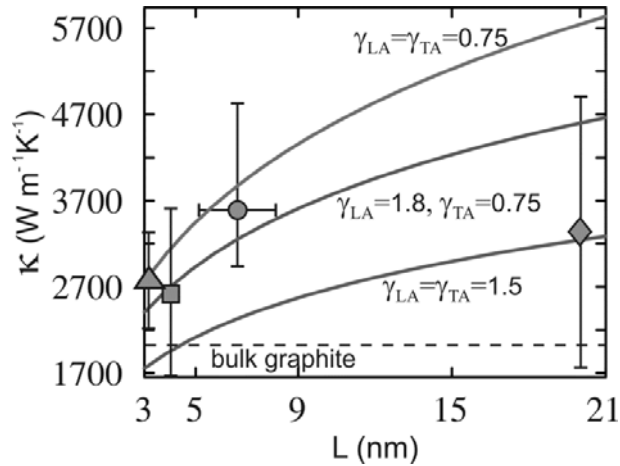


Fig. 4.5. Dependența conductibilității termice de rețea a grafenului de dimensiunea stratului la temperatura camerei. Sunt prezentate rezultatele pentru diferite combinații de parametri Gruneisen. Vom menționa dependența puternică a conductibilității termice de dimensiunile stratului de grafen. Pentru comparație sunt de asemenea prezentate valorile conductibilității termice din lucrările [47, 48] (cerculețe), [50] (pătratele), [51] romburi) și [111] (triunghiuri).

Conductibilitatea prezentată în Figura 4.5 este conductibilitatea termică proprie, limitată doar de procesele 3-fononice, dar este determinată pentru stratul cu dimensiunea spațială concretă  $L$ . În experimente conductibilitatea termică este de asemenea limitată de împrăștierea pe defectele rețelei cristaline, granule și pe frontierele stratului. Aceste împrăștiere pot fi introduse în model prin modificarea lui  $L$ . Aceste mecanisme „extrinseci” de împrăștiere împreună cu procesele fonon-fononice de ordin mai superior limitează creșterea conductibilității termice în cazul valorilor mari ale lui  $L$  [57].

Modelul analitic al conductibilității termice descris anterior nu ține cont de un aspect important al transportului fononic care ar fi bidimensionalitatea proceselor 3-fononice Umklapp. Există două tipuri de procese Umklapp [176]. Primul tip reprezintă împrăștierea, în care fononul cu vectorul de undă  $\vec{q}(\omega)$  asimilează fononul cu vectorul de undă  $\vec{q}'(\omega')$ . În rezultat se formează

fononul  $\vec{q}''(\omega'')$  în una din zonele Brillouin vecine. Pentru acest tip de împrăștiere legea conservării energiei și a impulsului poate fi scrisă în forma:

$$\begin{aligned} \vec{q}(\omega) + \vec{q}'(\omega') &= \vec{b}_i + \vec{q}''(\omega''), \quad i=1,2,3 \\ \omega + \omega' &= \omega'' \end{aligned} \quad (4.8)$$

Procesele de tipul doi reprezintă împrăștierea, în urma căreia fononul  $\vec{q}(\omega)$  se multiplică în doi fononi  $\vec{q}'(\omega')$  și  $\vec{q}''(\omega'')$  din zona Brillouin vecină. Legea conservării energiei și impulsului în acest caz are forma:

$$\begin{aligned} \vec{q}(\omega) + \vec{b}_i &= \vec{q}'(\omega') + \vec{q}''(\omega''), \quad i=1,2,3 \\ \omega &= \omega' + \omega'' \end{aligned} \quad (4.9)$$

În Ecuțiile (4.8-4.9)  $\vec{b}_i = \Gamma \vec{T}_i$  este unul din cei șase ( $i=1,2,\dots,6$ ) vectori ai rețelei inverse. Calculul conductibilității termice fononice în grafen, luând în calcul toate procesele 3-fononice Umklapp posibile, permise în Ecuțiile (4.8-4.9), a fost în premieră realizat în [6]. Pentru fiecare modă fononică  $(\vec{q}, s)$  au fost stabilite toate perechile de mode fononice  $(\vec{q}', s')$  și  $(\vec{q}'', s'')$ , pentru care se satisfac condițiile (4.8-4.9). În rezultat, în spațiul  $(\vec{q}')$  au fost construite diagramele de fază pentru toate tranzițiile 3-fononice [6].

În aproximația lungimilor de undă mari pentru elementul matricial al interacțiunii 3-fononice [138] a fost dedusă următoarea expresie pentru viteza de difuzie [6]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_U^{(I,II)}(s, \vec{q})} &= \frac{\hbar \gamma_s^2(\vec{q})}{3\pi \rho v_s^2(\vec{q})} \sum_{s's''; \vec{b}_i} \iint \omega_s(\vec{q}) \omega_{s'}(\vec{q}') \omega_{s''}(\vec{q}'') \times \{N_0[\omega_{s'}(\vec{q}')] \mp \\ &\mp N_0[\omega_{s''}(\vec{q}'')] + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\} \times \delta[\omega_s(\vec{q}) \pm \omega_{s'}(\vec{q}') - \omega_{s''}(\vec{q}'')] dq'_i dq'_\perp. \end{aligned} \quad (4.10)$$

În Ecuția (4.10) indicii superiori corespund tranzițiilor de tipul I, iar indicii inferiori – tranzițiilor de tipul II. Integrarea după  $q_i, q_\perp$  se face de-a lungul și perpendicular segmentelor, pentru care sunt satisfăcute condițiile (4.8-4.9). Principalele mecanisme de împrăștiere a fononilor în grafen sunt împrăștierea 3-fononice Umklapp (U), împrăștierea pe frontierele stratului („boundary” (B)) și împrăștierea pe defectele punctiforme („point-defect” (PD)):

$$1/\tau_{tot}(s, q) = 1/\tau_U(s, q) + 1/\tau_B(s, q) + 1/\tau_{PD}(s, q), \quad (4.11)$$

unde  $1/\tau_U = 1/\tau_U^I + 1/\tau_U^{II}$ ,  $1/\tau_B(s, q) = (v_s/L)((1-p)/(1+p))$  și  $1/\tau_{PD}(s, q) = S_0 \Gamma q_s \omega_s^2 / (4v_s)$ . În aceste formule  $v_s = d\omega_s/dq$ , iar parametrii  $p$ ,  $S_0$  și  $\Gamma$  sunt descriși în pagina 34.

În Figura 4.6 este prezentată dependența de temperatură a conductibilității termice de rețea în grafenul monostrat, calculată din Ecuția (4.11). La temperaturi joase conductibilitatea termică crește rapid la creșterea temperaturii datorită creșterii numărului de fononi. Micșorarea

conductibilității termice, care începe în regiunea temperaturii de 80 K, se explică prin amplificarea proceselor 3-fononice de împrăștiere Umklapp. Este interesant de a menționa faptul, că la temperaturi joase conductibilitatea este proporțională cu  $T^2$ . Într-un adevăr, pentru curba cu  $p = 0.9$  raportul  $\kappa(T=80 \text{ K})/\kappa(T=50 \text{ K}) = 2.50$ , pe când pătratul raportului temperaturilor  $(80/50)^2=2.56$ . Acest fapt este o dovadă clară a manifestării caracterului bidimensional al transportului fononic în grafen, deoarece în materialele volumetrice conductibilitatea termică este proporțională cu  $\sim T^3$  la temperaturi joase. Diferența în dependența de temperatură a conductibilității termice în grafenul 2D și în materialele volumetrice se explică prin deosebirea în densitatea stărilor fononice. Diferența mică dintre dependența  $\kappa(T)$  obținută și dependența de  $T^2$  se explică în cazul nostru prin faptul, că temperaturile cercetate nu sunt suficient de mici și că este prezentă împrăștierea fononilor pe frontierele stratului. Acest lucru este confirmat și de faptul, că abaterea de la dependența pătratică  $\sim T^2$  se majorează odată cu amplificarea împrăștierii superficiale (micșorarea parametrului  $p$ ).

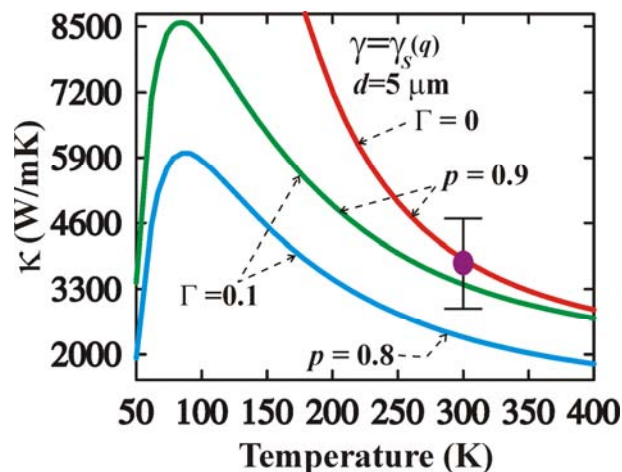


Fig. 4.6. Dependența de temperatură a conductibilității termice de rețea pentru stratul de grafen cu grosimea 5  $\mu\text{m}$  și parametri Grunesien, care depind de modele fononice. Sunt prezentate rezultatele pentru două valori ale parametrului  $p$  de împrăștiere a fononilor pe frontierele stratului și pentru două valori ale parametrului  $\Gamma$  de împrăștiere a fononilor pe defectele punctiforme. Pentru comparare sunt de asemenea prezentate valorile conductibilității termice din [50, 51]. Desenul a fost retipărit din [6] cu permisiunea “American Physical Society”.

În nanostraturile semiconductoare obișnuite conductibilitatea termică de rețea se micșorează odată cu micșorarea grosimii peliculei datorită amplificării împrăștierii superficiale a fononilor [8, 123, 124, 129]. Spre deosebire de nanostraturile semiconductoare, în grafenul multistrat s-a observat efectul invers de majorare a conductibilității termice la majorarea grosimii peliculei [54]. În Figura 4.7 este prezentată dependența de numărul straturilor monoatomare (de grosimea

peliculei) a conductibilității termice de rețea în grafenul multistrat. Dependența, care se observă experimental (și este simbolizată în grafic cu ajutorul cerculețelor) a fost explicată teoretic prin particularitățile transportului fononic 2D în grafen. La creșterea numărului  $n$  de monostraturi apar ramuri fononice suplimentare, care pot transporta căldura (vezi Figura 4.2). Însă în același timp crește și numărul tranzițiilor fononice permise. În rezultat, conductibilitatea termică se micșorează. Este important de a menționa faptul, că pentru grafenul acoperit cu un alt material sau depus pe substrat, dependența de grosime a conductibilității termice va fi una inversă. În lucrarea experimentală [120] se arată, că conductibilitatea termică a grafenului cu înveliș crește odată cu creșterea grosimii stratului de la  $K \approx 160 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  (pentru grafenul monostrat) până la  $K \sim 1000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  (pentru grafenul cu grosimea de 8 nm), temperatura fiind de  $T=310 \text{ K}$ . Astfel de dependență se explică prin faptul, că creșterea grosimii în grafenul cu înveliș duce la atenuarea influenței materialului învelișului asupra conductibilității termice, care treptat reproduce conductibilitatea termică a grafenului.

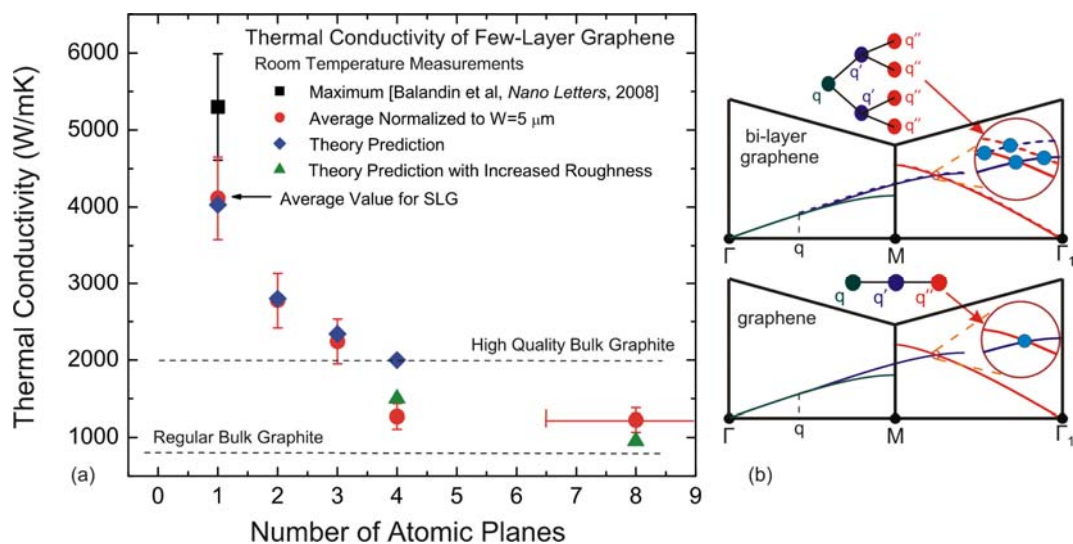


Fig. 4.7. (a) Dependența conductibilității termice a grafenului multistrat de numărul monostraturilor. Dreapta întreruptă indică conductibilitatea termică în grafitul volumetric. Cu cerculețe sunt indicate rezultatele experimentale. Valorile calculate ale conductibilității termice sunt indicate cu ajutorul romburilor și triunghiurilor. Romburile corespund rezultatelor obținute pentru modelul transportului fononic bidimensional în grafenul multistrat, care ține cont de toate tranzițiile 3-fononice 2D posibile (vezi Ecuțiile (4.9-4.11)). Triunghiurile indică rezultatele modelului simplificat Callaway–Klemens. (b) Diagrama împrăștierii 3-fononice „Umklapp” în grafenul monostrat și bistrat, care indică faptul, că în grafenul bistrat există mai multe posibilități de realizare a împrăștierii 3-fononice. Desenul a fost montat din publicația [54] cu permisiunea „Nature Publishing Group”.

### 4.3. Conductibilitatea termică fononică în fâșiile de grafen

Imaginea schematică a fâșiei de grafen cercetate este prezentată în Figura 4.8. Pentru studierea dependenței conductibilității termice a acestei structuri de dimensiunile transversale ale ei sunt luate în calcul procesele fononice anarmonice de ordinul doi și dependența unghiulară a împrăștierii fononilor pe frontiere. Dimensiunile fâșiei (grosimea  $d$  și lungimea  $L$ ) au fost alese din diapazonul micrometric, pentru a asigura transportul de difuzie al fononilor. În fâșiile de grafen cu dimensiuni transversale nanometrice are loc o cuantificare puternică a spectrului fononic și dependența conductibilității termice de dimensiuni este determinată, în temei, de transportul balistic al fononilor [115].

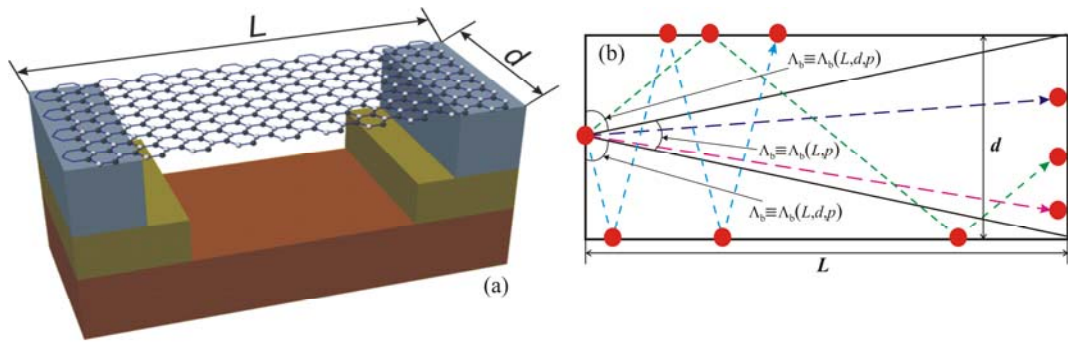


Fig. 4.8. (a) Imaginea schematică a fâșiei de grafen, utilizate în cercetările experimentale a conductibilității termice a grafenului atârnat. (b) Fâșie de grafen și notațiile utilizate în modelul, care ține cont de dependența unghiulară a împrăștierii fononilor pe frontierele stratului. Desenul a fost retipărit din [57] cu permisiunea “American Chemical Society”.

Perioada totală de difuzie a modei fononice ( $s, q$ ) are forma [57]:

$$1/\tau_{tot}(s, \vec{q}) = 1/\tau_U(s, \vec{q}) + 1/\tau_2(s, \vec{q}) + 1/\tau_B(s, \vec{q}), \quad (4.12)$$

unde  $\tau_{2,s}$  reprezintă perioada de difuzie a fononilor de ordinul doi [57, 174], iar  $\tau_B = \Lambda_b(s, \vec{q}, p)/v_s^{\parallel}(\vec{q})$  este perioada de difuzie fononică pe frontierele fâșiei. Calculul mărimii  $\tau_{U,s}$  s-a efectuat conform Ecuației (4.10). Lungimea parcursului liber al fononilor  $\Lambda_b(s, \vec{q}, p)$  cu împrăștierii pe frontierele fâșiei s-a calculat ținând cont de unghiul  $\varphi$  dintre  $\vec{q}$  și direcția gradientului de temperatură pentru fiecare modă fononică. De aceea, în cazul fâșiei dreptunghiulare  $\tau_B$  depinde și de  $d$ , și de  $L$  (vezi Figura 4.8 (b)).

Pentru determinarea perioadei  $\tau_2(s, \vec{q})$  a fost cercetat următorul proces de împrăștiere fononică [57]: fononul cu lungime de undă mare și vectorul de undă  $\vec{q}$  interacționează cu fononul  $\vec{q}'$  cu lungime de undă mică în procesul normal, soldat cu formarea fononului virtual

$\bar{q}_i$ . În continuare acest fonon interacționează cu fononul  $\bar{q}$  în procesul „Umklapp” cu crearea fononului  $\bar{q}'$ . Viteza de difuzie a fononilor în acest proces are forma [57]:

$$\frac{1}{\tau_{2,s}} = \frac{32}{9} \left( \frac{k_B T}{M(v_s^\parallel)^2} \right)^2 \gamma_s^4 \int \left( \frac{a}{2\pi} \right)^4 (\omega')^2 \delta(\Delta\omega) d\bar{q}' d\bar{q} \quad (4.13)$$

Ecuția (4.13) a fost dedusă în cadrul abordării, descrise în [174], dar ținându-se cont de densitatea 2D a stărilor fononice [57]. În [57] s-a arătat, că Ecuția (4.13) poate fi scrisă în formă aproximativă astfel:

$$\frac{1}{\tau_{2,s}} = \frac{2\pi}{9} \left( \frac{k_B T}{M(v_s^\parallel)^2} \right)^2 \gamma_s^4 \omega_{\max,s} \quad (4.14)$$

În Figura 4.9 este prezentată dependența conductibilității termice de rețea a fâșiei dreptunghiulare din grafen de lungimea ei  $L$  pentru diferite valori ale parametrului  $p$  și a grosimii fâșiei  $d$ . Rezultatele date corespund temperaturii de cameră. Fononii cu lungime de undă mare participă slab în procesele 3-fononice „Umklapp”. De aceea aportul lor în conductibilitatea termică este în mare parte limitat de împrăștierea pe frontierele fâșiei până la  $L \sim 100 \mu\text{m}$ . Pentru  $L > 100 \mu\text{m}$  procesele anarmonice de împrăștiere de speța a doua devin mecanismul principal de împrăștiere a fononilor cu lungime de undă mare. O particularitate interesantă a dependenței din Figura 4.9 este dependența nemonotonă de  $L$  a conductibilității termice. Această nemonotonie semnifică faptul, că conductibilitatea termică a fâșiei din grafen cu oarecare lungime și lățime poate fi mai mare decât conductibilitatea termică a fâșiei cu alte dimensiuni și geometrie.

Dependența nemonotonă a conductibilității termice a fâșiei de lungimea ei poate fi explicată în felul următor. În fâșie dreptunghiulară o parte din fononii acustici cu unghiul  $\varphi < \arcsin(d/\sqrt{d^2 + L^2})$  nu se împrăștie pe frontierele peliculei. Lungimea parcursului liber mediu a acestor fononi  $\Lambda_b = L/\cos(\varphi)$  se determină doar de lungimea  $L$  a peliculei (la o valoare fixată a lui  $d$ ) și este ilustrată schematic în Figura 4.8 (b) cu ajutorul săgeților întrerupte. Ceilalți fononi se împrăștie pe frontieră și lungimea parcursului liber al lor  $\Lambda_b$  depinde și de  $L$ , și de  $d$  (fiind prezentată schematic în Figura 4.8 (b) prin săgeți continui):  $\Lambda_b \approx \sqrt{(d \cdot n)^2 + L^2}$  dacă  $n \leq (1+p)/(1-p)$  și  $\Lambda_b = d \cdot (1+p)/(1-p)$  în celelalte cazuri, iar  $n$  indică numărul de reflecții de la frontierele peliculei. Numărul de reflecții a fost calculat numeric (la valori fixe pentru  $L$ ,  $d$ , și  $\varphi$ ) din condiția  $\Lambda_b \cdot \cos(\varphi) \leq L$ . Comportamentul diferit al aporturilor în conductibilitatea termică, pe care îl aduc două grupuri de fononi la modificarea lui  $L$ , cât și împrăștierea anarmonică anizotropă, duc la o dependență nemonotonă de lungime a conductibilității termice.

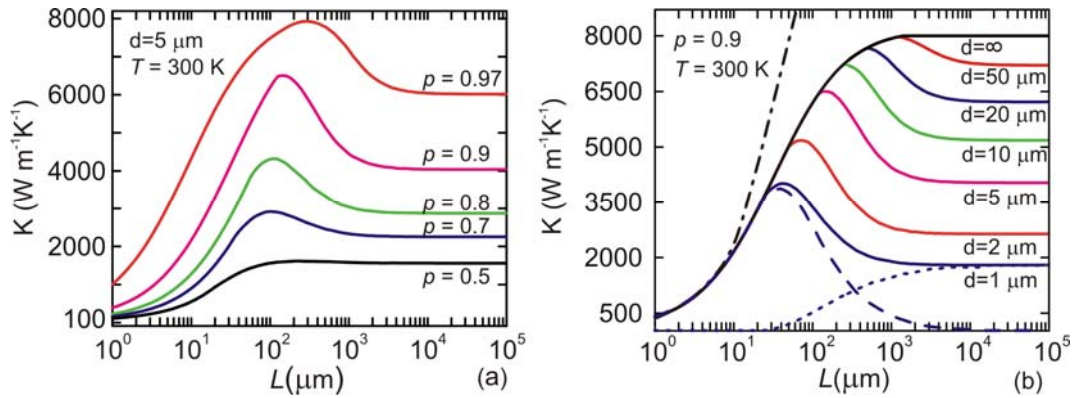


Fig. 4.9. (a) Dependența conductibilității termice a fâșiei de grafen cu lățimea  $d = 5 \mu\text{m}$  de lungimea  $L$  a ei la diferite valori ale parametrului  $p$ . (b) Dependența conductibilității termice a fâșiei pătrate de grafen de lungimea  $L$  a ei la diferite grosimi  $d$  pentru  $p=0.9$ . Desenul a fost retipărit din [57] cu permisiunea “American Chemical Society”.

Pentru valori mici ale lui  $L$ , principalii transportatori de căldură sunt fononii, a căror lungime medie a parcurșului liber depinde doar de  $L - \Lambda_b(L)$ . Aportul în conductibilitatea termică a acestui grup de fononi în fâșie cu  $d = 1 \mu\text{m}$  este prezentat în Figura 4.9 (b) cu ajutorul liniei întrerupte. Creșterea lui  $L$  duce la micșorarea lui  $\varphi$  și la o micșorare corespunzătoare a numărului de fononi din primul grup, în același timp se majorează numărul fononilor din grupul al doilea, la care lungimea medie a parcurșului liber depinde de  $L$ ,  $d$  și  $p$ . De aceea aportul fononilor din cel de-al doilea grup (fiind prezentat în Figura 4.9(b) cu ajutorul liniei punctiforme) și condiționează apariția maximumului în curbele conductibilității termice. Pentru  $L > \sim 100 \mu\text{m}$ ,  $\Lambda_b$  este determinat, în temei, de lățimea  $d$  a fâșiei și conductibilitatea termică tinde spre o valoare constantă. Această valoare pentru  $d=5 \mu\text{m}$  se află într-un acord perfect cu datele experimentale [47,48]. Valorile obținute pentru valori mai mari ale lui  $d$  și pentru  $p \rightarrow 1$  sunt mai mari decât cele experimentale, deoarece modelul nu ține cont de împrăștierea fononilor pe defectele punctiforme ale rețelei și pe granule.

Rezultatele prezentate în Figura 4.9(a) denotă faptul, că dependența nemonotonă neobișnuită  $\kappa(L)$  se observă doar în fâșiile de grafen cu o împrăștiere relativ slabă a fononilor pe frontiere,  $p > 0.5$ . Valoarea  $p=1$  corespunde cazului, când toți fononii se reflectă elastic de la frontieră și î-și păstrează impulsul de-a lungul lungimii fâșiei. De fapt, aceasta semnifică faptul, că împrăștierea nu limitează lungimea parcurșului liber al fononului și transportul de căldură. Dependența nemonotonă  $\kappa(L)$  dispare de asemenea în cazul fâșiilor pătrate și cilindrice, numite membrane din grafen, care se utilizează în unele experimente [50, 52]. Rezultatele, obținute pentru fâșiile infinite de groase ( $d \rightarrow \infty$ ) demonstrează o creștere monotonă a conductibilității termice și o

saturație pentru  $L > 100 \mu\text{m}$ . Acest rezultat se află în acord bun cu prezicerile, făcute pentru nanotuburile de carbon [175]. Ca și în cazul nanotuburilor, conductibilitatea termică a fâșiilor din grafen, care este limitată doar de împrăștierea 3-fononică Umklapp, crește nelimitat la majorarea lui  $L$  (vezi curba din linii întrerupte și puncte din Figura 4.9(b)) fără a tinde spre o valoare constantă de saturație. Desigur, valoarea conductibilității termice se asigură doar la antrenarea în model a proceselor anarmonice de ordinul doi.

#### **4.4. Concluzii la Capitolul 4**

În acest capitol este prezentată sinteza rezultatelor cercetării transportului fononic bidimensional în grafen. Fononii sunt principalii transportatori de căldură în grafenul monostrat și multistrat la temperaturi apropiate de temperatura camerei. Natura bidimensională unică a transportului de căldură în grafen este responsabilă de dependența neobișnuită a conductibilității termice de dimensiunile și forma mostrei, de calitatea frontierelor lui și de defectele rețelei cristaline. Rezultatele descrise demonstrează, că grafenul este un material cu perspective largi pentru îmbunătățirea evacuării căldurii și optimizarea managementului termic în electronica și optoelectronica modernă.



## CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

Rezultatele principale, prezentate în Referatul Științific, sunt enumerate mai jos:

1. Nanostructurile semiconductoare multistrat cvazi-unidimensionale și cvazi-bidimensionale și grafenul sunt de perspectivă pentru ingineria fononică: modificarea determinată a proprietăților fononice a acestor nanostructuri duce la îmbunătățirea proprietăților termice ale lor și la majorarea mobilității electronilor. *Astfel, a fost elaborată (teoretic) o abordare fundamental nouă de îmbunătățire a proprietăților termoconductibile și electroconductibile ale nanostructurilor semiconductoare și a grafenului, prin ingineria stărilor fononice ale lor.*
2. În cadrul abordării continuele și a două modele dinamice pentru oscilațiile rețelei cristaline („Face-centered cubic cell” și „Born-von Karman”) am stabilit, că straturile de înveliș influențează puternic spectrul energetic al fononilor și conductibilitatea termică de rețea a nanostraturilor și nanofirelor. Învelișurile cu o viteză a sunetului mai înaltă (mai joasă) vor majora (micșora) viteza medie de grup a fononilor și fluxul de căldură prin nanostrat/nanofir comparativ cu nanostratul/nanofirul fără înveliș.
3. Mobilitatea electronului în nanostraturile din siliciu poate fi majorată prin acoperirea lor cu înveliș, care posedă o viteză a sunetului mai înaltă, decât în siliciu. Mobilitatea electronilor în nanostructura Diamant/Si/Diamant cu grosimea nanostraturilor 10 nm/ 2 nm/ 10 nm este de 2 – 10 ori mai mare, decât în nanostratul din siliciu. Majorarea mobilității se explică prin modificarea spectrului energetic al fononilor și prin suprimarea interacțiunii electron-fononice.
4. Mobilitatea electronului în nanostructurile AlN/GaN/AlN cu rețea de tip „wurtzite” poate fi majorată de 2 – 5 ori prin compensarea câmpului electric încorporat cu un câmp electric exterior ori prin crearea unui nanostrat de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  în centrul stratului de GaN cu  $x \sim 0.05$ . Acest efect se explică prin modificarea poziției maximumului funcției de undă și prin suprimarea interacțiunii electronului cu fononii optici polari.
5. Conductibilitatea termică de rețea „in-plane” în grafenul monostrat și multistrat depinde puternic de parametrii straturilor: dimensiunile și forma straturilor, calitatea frontierelor lui și defectele rețelei cristaline. Conductibilitatea termică de rețea la temperatura camerei a grafenului monostrat cu lățimea de 5  $\mu\text{m}$  este situată în diapazonul 3500 – 5000  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Conductibilitatea termică se micșorează rapid la majorarea numărului  $n$  de monostraturi și atinge valoarea conductibilității termice a grafitului pirolitic cu orientare superioară pentru  $n=4$ . Conductibilitatea termică de rețea „in-plane” a fâșiilor de grafen demonstrează o dependență nemonotonă de dimensiunea fâșiei

datorită valorii mari a parcursului liber mediu pentru fononii acustici cu lungime de undă mare.

6. În grafenul bistrat „twisted” apar modele fononice hibride „folded”, care depind de unghiul de rotație dintre straturi și sunt o consecință a amestecării modelor fononice cu diferită orientare în zona Brillouin a grafenului bistrat obișnuit (fără rotație dintre straturi).

În baza rezultatelor prezentate pot fi formulate următoarele recomandări practice:

- Utilizarea practică a ingineriei fononice în nanostructuri poate îmbunătăți parametrii funcționali ai dispozitivelor electronice moderne în bază de nanostructuri și managementul termic în circuitele electronice moderne;
- Nanostructurile noi cu mode fononice optimizate, așa ca nanofirele segmentate ori nanofirele cu secțiune transversală variabilă, sunt de perspectivă pentru aplicațiile termoelectrice și termoizolante;
- Grafenul și materialele în bază de grafen pot permite accelerarea evacuării căldurii de la cip-urile electronice moderne, cât și pot îmbunătăți managementul termic în dispozitivele și circuitele electronice moderne.

Rezultatele teoretice obținute permit de a interpreta particularitățile conductibilității termice fononice în nanostructuri și aduc un aport real în înțelegerea mai profundă a transportului fononic și a proceselor fononice în nanostructurile semiconductoare cvazi-bidimensionale și cvazi-unidimensionale, cât și în grafen.

## BIBLIOGRAFIE

1. Ziman J. *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. New York: Oxford University Press, 1960. 554 p.
2. Anselm A. *Introduction to semiconductor theory*. Moscow: Mir Publishers, 1981. 490 p.
3. Strocio M., Dutta M. *Phonons in Nanostructures*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. 282 p.
4. Wirtz L. and Rubio A. The phonon dispersion of graphite revisited. In: *Solid State Communications*, 2004, vol. 131, p. 141-152.
5. Mounet N. and Marzari N. First-principles determination of the structural, vibrational and thermodynamic properties of diamond, graphite, and derivatives. In: *Physical Review B*, 2005, vol. 71, p. 205214.
6. Nika D. et al. Phonon thermal conduction in graphene: role of Umklapp and edge roughness scattering. In: *Physical Review B*, 2009, vol. 79, p. 155413.
7. Balandin A., and Wang K. Effect of phonon confinement on the thermoelectric figure of merit of quantum wells. In: *Journal of Applied Physics*, 1998, vol. 84, p. 6149-6153.
8. Balandin A., and Wang K. Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well. In: *Physical Review B*, 1998, vol. 58, 3, p. 1544.
9. Balandin A., Pokatilov E., Nika D. *Phonon Engineering in Hetero- and Nanostructures*. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2007, vol. 2, p. 140-170.
10. Klitsner T. and Pohl R. Phonon scattering at silicon crystal surfaces. In: *Physical Review B*, 1987, vol. 36, p. 6551-6565.
11. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. A phonon depletion effect in ultrathin heterostructures with acoustically mismatched layers In: *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 85, p. 825-827.
12. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. Acoustic-phonon propagation in rectangular semiconductor nanowires with elastically dissimilar barriers. In: *Physical Review B*, 2005, 72, p. 113311.
13. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. Acoustic phonon engineering in coated cylindrical nanowires. In: *Superlattices and Microstructures*, 2005, vol. 38, p. 168-183.
14. Pokatilov E., Nika D., and Balandin A. Confined electron-confined phonon scattering rates in wurtzite AlN/GaN/AlN heterostructures. In: *Journal of Applied Physics*, 2004, vol. 95, p. 5626-5632.

15. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. et al. Phonon spectrum and group velocities in AlN/GaN/AlN and related heterostructures. In: Superlattices and Microstructures, 2003, vol. 33, 155-171.
16. Benisty H., Sotomayor-Torres C., Weisbuch C. Intrinsic mechanism for the poor luminescence properties of quantum-box systems In: Physical Review B, 1991, vol. 44, p. 10945.
17. Klimin S., Pokatilov E., Fomin V. Polaronic hamiltonian and polar optical vibrations in multilayer structures. Physica Status Solidi (b), 1995, 190, 441-453.
18. Pokatilov E. et al. Excitons in wurtzite AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> quantum-well heterostructures. In: Physical Review B, 2008, vol. 77, 125328
19. Rytov S. Acoustical properties of a thinly laminated medium. In: Soviet Physics – Acoustics, 1956, vol. 2, p. 67-80.
20. Colvard C. et al. Folded acoustic and quantized optic phonons in (GaAl)As superlattices. In: Physical Review B, 1985, vol. 31, p. 2080.
21. Bannov N., Mitin V., Stroschio M. Confined acoustic phonons in a free-standing quantum well and their interaction with electrons. In: Physica Status Solidi (b), 1994, vol. 183, p. 131-142.
22. Nishiguchi N., Ando Y., Wybourne M. Acoustic phonon modes of rectangular quantum wires. In: Journal of Physics: Condensed Matter, 1997, vol. 9, p. 5751.
23. Svizhenko A. et al. Electron interaction with confined acoustic phonons in quantum wires subjected to a magnetic field. In: Physical Review B, 1998, vol. 57, p. 4687.
24. Veliadis J. et al. Engineering of the nonradiative transition rates in modulation-doped multiple-quantum wells. In: IEEE Journal of Quantum Electronics, 1996, vol. 32, p. 1155-1160.
25. Zou J., Balandin A. Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire. In: Journal of Applied Physics, 2001, vol. 89, p. 2932.
26. Khitun A., Balandin A., Wang K. Modification of the thermal conductivity in silicon quantum wires due to spatial confinement of acoustic phonons. In: Superlattices and Microstructures, 1999, vol. 26, p. 181-193.
27. Khitun A. et al. Enhancement of the thermoelectric figure of merit of Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> quantum wires due to spatial confinement of acoustic phonons. In: Physica E, 2000, vol. 8, p. 13-18.
28. Khitun A. et al. In-plane lattice thermal conductivity of a quantum-dot superlattice. In: Journal of Applied Physics, 2000, vol. 88, p. 696-699.

29. Balandin A., Nika D. Phononics in low-dimensional materials. In: *Materials Today*, 2012, vol. 15, p. 266-275.
30. Balandin A. Thermoelectric applications of low-dimensional structures with acoustically mismatched boundaries. In: *Physics of Low-Dimensional Structures*, 2000, vol. 5/6, p. 73-91.
31. Casian A. et al. Thermoelectric properties of n-type PbTe/Pb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te quantum wells. In: *Physical Review B*, 2000, vol. 61, p. 15965 – 15974.
32. Casian A., Sanduleac I. Thermoelectric Properties of Tetrathiotetracene Iodide Crystals: Modeling and Experiment. In: *Journal of Electronic Materials*, 2014, vol. 43, p. 3740 – 3745.
33. Sakaki, H. Scattering suppression and high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures. In: *Japanese Journal of Applied Physics*, 1980, vol. 19, p. L735-L738.
34. Fonoberov V., Balandin A. Giant enhancement of the carrier mobility in silicon nanowires with diamond coating. In: *Nano Letters*, 2006, vol. 6, p. 2442-2446.
35. Nika D., Pokatilov E., Balandin A. Phonon-engineered mobility enhancement in the acoustically mismatched silicon/diamond transistor channels. In: *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 93, p. 173111.
36. Zinenco N. et al. Acoustic phonon engineering of thermal properties of silicon-based nanostructures. In: *Journal of Physics: Conference Series*. 2007, vol. 92, p. 012086.
37. Nika D., Zinenco N., Pokatilov E. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2009, vol. 4, p. 180-185.
38. Lazarenkova O., Balandin A. Electron and phonon energy spectra in a three-dimensional regimented quantum dot superlattice. In: *Physical Review B*, 2002, vol. 66, p. 245319.
39. Balandin A. and Lazarenkova O. Mechanism for thermoelectric figure-of-merit enhancement in regimented quantum dot superlattices. In: *Applied Physics Letters*, 2003, vol. 82, p. 415-417.
40. Nika D. et al. Reduction of lattice thermal conductivity in one-dimensional quantum-dot superlattices due to phonon filtering. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, p. 165415.
41. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. Built-in field effect on the electron mobility in AlN/GaN/AlN quantum wells. In: *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 89, p. 113508.

42. Pokatilov E., Nika D., Balandin A. Electron mobility enhancement in AlN/GaN/AlN heterostructures with InGaN nanogrooves. In: Applied Physics Letters, 2006, vol. 89, p. 112110.
43. Pokatilov E. et al. Size-quantized oscillations of the electron mobility limited by the optical and confined acoustic phonons in the nanoscale heterostructures. In: Journal of Applied Physics, 2007, vol. 102, p. 054304.
44. Hu M. et al. Significant reduction of thermal conductivity in si/ge core-shell nanowires. In: Nano Letters, 2011, vol. 11, p. 618-623.
45. Wingert M. et al. Thermal conductivity of Ge and Ge-Si core-shell nanowires in the phonon confinement regime. In: Nano Letters, 2011, vol. 11, p. 5507-5513.
46. Balandin A. Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials. In: Nature Materials, 2011, vol. 10, p. 569-581.
47. Balandin A. et al. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. In: Nano Letters, 2008, vol. 8, p. 902-907.
48. Ghosh S. et al. Extremely high thermal conductivity in graphene: Prospects for thermal management application in nanoelectronic circuits. In: Applied Physics Letters, 2008, vol. 92, p. 151911.
49. Nika D. et al. Lattice thermal conductivity of graphene flakes: comparison with bulk graphite. In: Applied Physics Letters, 2009, vol. 94, p. 203103.
50. W. Cai et al. Thermal transport in suspended and supported monolayer graphene grown by chemical vapor deposition. In: Nano Letters, 2010, vol. 10, p. 1645-1651.
51. Jauregui L. et al. Thermal transport in graphene nanostructures: experiments and simulations. In: ECS Transactions, 2010, vol. 28, p. 73-83.
52. Faugeras C. et al. Thermal conductivity of graphene in Corbino membrane geometry. In: ACS Nano, 2010, vol. 4, p. 1889-1892.
53. Seol J. et al. Two-dimensional phonon transport in supported graphene. In: Science, 2010, vol. 328, p. 213-216.
54. Ghosh S. et al. Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene. In: Nature Materials, 2010, vol. 9, p. 555-558.
55. Maultzsch J. et al. Phonon dispersion in graphite. In: Physical Review Letters, 2004, vol. 92, p. 075501-1-4.
56. Nika D., Pokatilov E., Balandin A. Theoretical description of thermal transport in graphene: The issue of phonon cut-off frequencies and polarization branches. In: Physica Status Solidi B, 2011, vol. 248, p. 2609-2614.

57. Nika D., Askerov A., Balandin A. Anomalous size dependence of the thermal conductivity graphene ribbons. In: *Nano Letters*, 2012, vol. 12, p. 3238-3244.
58. Cocemasov A., Nika D., Balandin A. Phonons in twisted bilayer graphene. In: *Physical Review B*, 2013, vol. 88, p. 035428-1-12.
59. Falkovsky L.A. Symmetry constraints on phonon dispersion in graphene. In: *Physics Letters A*, 2008, vol. 372, p. 5189-5192.
60. Perebeinos V., Tersoff J. Valence force model for phonons in graphene and carbon nanotubes. In: *Physical Review B*, 2009, vol. 79, p. 241409(R).
61. Alofi A., Srivastava G. Phonon conductivity in graphene. In: *Journal of Applied Physics*, 2012, vol. 112, p. 013517.
62. Droth M., Burkard G. Acoustic phonon and spin relaxation in graphene nanoribbons. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, p. 155404.
63. Qian J., et al. Quantized long-wavelength optical phonon modes in graphene nanoribbon in the elastic continuum model. In: *Superlattices and Microstructures*, 2009, vol. 46, p. 881-888.
64. Yan J-A., Ruan W.Y., Chou M.Y. Phonon dispersions and vibrational properties of monolayer, bilayer, and trilayer graphene: density-functional perturbation theory. In: *Physical Review B*, 2008, vol. 77, p. 125401.
65. Wang H. et al. Vibrational properties of graphene and graphene layers. In: *Journal of Raman Spectroscopy*, 2009, vol. 40, p. 1791-1796.
66. Lindsay L., Broido D., Mingo N. Flexural phonons and thermal transport in multilayer graphene and graphite. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 83, p. 235428.
67. Singh D., Murthy J., Fisher T. Mechanism of thermal conductivity reduction in few-layer graphene. In: *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, p. 044317.
68. Lindsay L., Broido D. Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene. In: *Physical Review B*, 2010, vol. 81, p. 205441.
69. Evans W., Hu L., Koblinsky P. Thermal conductivity of graphene ribbons from equilibrium molecular dynamics: effect of ribbon width, edge roughness, and hydrogen termination. In: *Applied Physics Letters*, 2010, vol. 96, p. 203112.
70. Zhong W. et al. Chirality and thickness-dependent thermal conductivity of few-layer graphene: a molecular dynamics study. In: *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, p. 113107.

71. Zhang H., Lee G., Cho K. Thermal transport in graphene and effects of vacancies. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, p. 115460.
72. Wei Z. et al. In-plane lattice thermal conductivities of multilayer graphene films. In: *Carbon*, 2011, vol. 49, p. 2653-2658.
73. Ong Z.-Y., Pop E. Effect of substrate modes on thermal transport in supported graphene. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, p. 075471.
74. Wei N. et al. Strain engineering of thermal conductivity in graphene sheets and nanoribbons: a demonstration of magic flexibility. In: *Nanotechnology*, 2011, vol. 22, p. 105705.
75. Hao F., Fang D., Xu Z. Mechanical and thermal transport properties of graphene with defects. In: *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 99, p. 041901.
76. Mortazavi B., Ahzi S. Thermal conductivity and tensile response of defective graphene: A molecular dynamics study. In: *Carbon*, 2013, vol. 63, p. 460-470.
77. Ng T., Yeo J., Liu Z. A molecular dynamics study of the thermal conductivity of graphene nanoribbons containing dispersed Stone-Thrower-Wales defects. In: *Carbon*, 2012, vol. 50, p. 4887-4893.
78. Jang Y. et al. Thermal conductivity of defected graphene. In: *Physics Letters A*, 2012, vol. 376, p. 3668.
79. Yeo J., Liu Z., Ng T. Comparing the effects of dispersed Stone-Thrower-Wales defects and double vacancies on the thermal conductivity of graphene nanoribbons. In: *Nanotechnology*, 2012, vol. 23, p. 385702.
80. Yang D. et al. Influence of typical defects on thermal conductivity of graphene nanoribbons: An equilibrium molecular dynamics simulation. In: *Applied Surface Science*, 2012, vol. 258, p. 9926-9931.
81. Park M., Lee S., Kim Y. Length-dependent thermal conductivity of graphene and its macroscopic limit. *Journal of Applied Physics*, 2013, vol. 114, p. 053506.
82. Yu C., Zhang G. Impacts of length and geometry deformation on thermal conductivity of graphene nanoribbons. In: *Journal of Applied Physics*, 2013, vol. 113, p. 044306.
83. Cao A. Molecular dynamics simulation study on heat transport in monolayer graphene sheet with various geometries. In: *Journal of Applied Physics*, 2012, vol. 111, p. 083528.
84. Cao H.-Y. et al. Layer and size dependence of thermal conductivity in multilayer graphene. In: *Physics Letters A*, 2012, vol. 376, p. 525-528.
85. Cheng L., Kumar S. Thermal transport in graphene supported on copper. In: *Journal of Applied Physics*, 2012, vol. 112, p. 043502.



86. Yeo P., Loh K., Gan C. Strain dependence of the heat transport properties of graphene nanoribbons. In: *Nanotechnology*, 2012, vol. 23, p. 495702.
87. Ma F. et al. Strain effect on lattice vibration, heat capacity, and thermal conductivity of graphene. In: *Applied Physics Letters*, 2012, vol. 101, p. 111904.
88. Huang Z., Fisher T., Murthy J. Simulation of phonon transmission through graphene and graphene nanoribbons with a Green's function method. In: *Journal of Applied Physics*, 2010, vol. 108, p. 094319.
89. Zhai X., Jin G. Stretching-enhanced ballistic thermal conductance in graphene nanoribbons. In: *EPL*, 2011, vol. 96, p. 16002.
90. Klemens P. Theory of the a-plane thermal conductivity of graphite. In: *Journal of Wide Bandgap Materials*, 2000, vol. 7, p. 332-339.
91. Aksamija Z., Knezevic I. Lattice thermal conductivity of graphene nanoribbons: anisotropy and edge roughness scattering. In: *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, p. 141919.
92. Klemens P., Pedraza D. Thermal conductivity of graphite in basal plane. In: *Carbon*, 1994, vol. 32, p. 735-741.
93. Adamyan V., Zavalniuk V. Lattice thermal conductivity of graphene with conventionally isotopic defects. In: *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2012, vol. 24, p. 415406.
94. Aksamija Z., Knezevic I. Thermal transport in graphene nanoribbons supported on SiO<sub>2</sub>. In: *Physical Review B*, 2012, vol. 86, 165426.
95. Nika D., Balandin A. Two-dimensional phonon transport in graphene. In: *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2012, vol. 24, 233203-1-18.
96. Savin A., Kivshar Y., Hu B. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges. In: *Physical Review B*, 2010, vol. 82, p. 195422.
97. Hu J., Ruan X., Chen Y. Thermal conductivity and thermal rectification in graphene nanoribbons: a molecular dynamic study. In: *Nano Letters*, 2009, vol. 9, p. 2730-2735.
98. Guo Z., Zhang D., Gong X.-G. Thermal conductivity of graphene nanoribbons. In: *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 95, p. 163103.
99. Ouyang T. et al. Thermal transport of isotopic-superlattice graphene nanoribbons with zigzag edge. In: *Europhysics Letters*, 2009, vol. 88, p. 28002.
100. Chen S. et al. Thermal conductivity of isotopically modified graphene. In: *Nature Materials*, 2012, vol. 11, p. 203-207.
101. Jiang J. et al. Isotopic effects on the thermal conductivity of graphene nanoribbons: localization mechanism. In: *Journal of Applied Physics*, 2010, vol. 107, p. 054314.

102. Zhang H. et al. Isotope effect on the thermal conductivity of graphene. In: *Journal of Nanomaterials*, 2010, vol. 53, p. 7657
103. Hu J. et al. Tuning the thermal conductivity of graphene nanoribbons by edge passivation and isotope engineering: a molecular dynamics study. In: *Applied Physics Letters*, 2010, vol. 97, p. 133107.
104. Jinag J.-W., Wang B.-S., Wang J.-S. First principle study of the thermal conductance in graphene nanoribbon with vacancy and substitutional silicon defects. In: *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 98, p. 113114.
105. Hu J. et al. Nonlinear thermal transport and negative differential thermal conductance in graphene nanoribbons. In: *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 99, p. 113101.
106. Xie Z.-X., Chen K.-Q., Duan W. Thermal transport by phonons in zigzag graphene nanoribbons with structural defects. In: *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2011, vol. 23, p. 315302.
107. Murali R. et al. Breakdown current density of graphene nanoribbons. In: *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 94, p. 243114.
108. Liao A. et al. Thermally limited current carrying ability of graphene nanoribbons. In: *Physical Review Letters*, 2011, vol. 106, p. 256801.
109. Wemhoff A. A review of theoretical techniques for graphene and graphene nanoribbon thermal conductivity prediction. In: *International Journal of Transport Phenomena*, 2012, vol. 13, p. 121-141.
110. Dorgan V. et al. High-field electric and thermal transport in suspended graphene. In: *Nano Letters*, 2013, vol. 13, p. 4581-4586.
111. Li H. et al. Thermal conductivity of twisted bilayer graphene. In: *Nanoscale*, 2014, vol. 6, p. 13402-13408.
112. Fu X. et al. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene. In: *Nature Communications*, 2015, vol. 5, p. 3689.
113. Lindsay L., Broido D., Mingo N. Diameter dependence of carbon nanotube thermal conductivity and extension to the graphene limit. In: *Physical Review B*, 2010, vol. 82, p. 161402.
114. Alofi A., Srivastava G. Thermal conductivity of graphene and graphite. In: *Physical Review B*, 2013, vol. 87, p. 115421.
115. Munoz E., Lu J., Yakobson B. Ballistic thermal conductance of graphene ribbons. In: *Nano Letters*, 2010, vol. 10, p. 1652-1656.

116. Jiang J-W., Wang J-S., Li B. Thermal conductance of graphite and dimerite. In: *Physical Review B*, 2009, vol. 79, p. 205418.
117. Lindsay L. et al. Phonon thermal transport in strained and unstrained graphene from first principles. In: *Physical Review B*, 2015, vol. 89, p. 155426.
118. Barbarino G., Melis C., Colombo L. Intrinsic thermal conductivity in monolayer graphene is ultimately upper limit: A direct estimation by atomistic simulations. In: *Physical Review B*, 2015, vol. 91, p. 035416.
119. Pettes M. et al. Influence of polymeric residue on the thermal conductivity of suspended bilayer graphene. In: *Nano Letters*, 2011, vol. 11, p. 1195-1200.
120. Jang W. et al. Thickness-dependent thermal conductivity of encased graphene and ultrathin graphite. In: *Nano Letters*, 2010, vol. 10, p. 3909-3913.
121. Wang Z. et al. Thermal transport in suspended and supported few-layer graphene. In: *Nano Letters*, 2011, vol. 11, p. 113-118.
122. Jang W. et al. Thermal conductivity of suspended few-layer graphene by a modified T-bridge method. In: *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, p. 133102.
123. Cocemasov A., Nika D. Phonons and phonon thermal conductivity in silicon nanolayers. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2012, vol. 7, p. 370-375.
124. Nika D., Zincenco N., Pokatilov E. Lattice thermal conductivity of ultra-thin freestanding layers: Face-centered cubic cell model versus Continuum Approach. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2009, vol. 4, p. 170-173.
125. Nika D. Phonon engineering in graphene and semiconductor nanostructures. Chişinau: CEP USM, 2015. 185 p.
126. Landau L., Lifshits E. M. *Theory of Elasticity*. Moscow: Fizmatlit, 2001.
127. Fedorov F.I. *Theory of elastic waves in crystals*. New York: Springer Science + Business Media, 1968.
128. Li D. et al. Thermal conductivity of individual silicon nanowires. In: *Applied Physics Letters*, 2003, vol. 83, p. 2934-2936.
129. Liu W., Ashegi M. Thermal conductivity measurement of ultra-thin single crystal silicon layers. In: *Journal of Heat Transfer*, 2006, vol. 128, p. 75-83.
130. Meson W. *Physical Acoustic*. New York: Academic Press, vol. I, part A, 1964.
131. Keating P. Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure. In: *Physical Review B*, 1966, vol. 145, p. 637-645.
132. Born M., Huang K. *Dynamic theory of crystal lattices*. Oxford: Oxford University Press, 1954.

133. Leibfried G., Ludwig W. Theory of anharmonic effects in crystals. In: Solid State Physics, 1961, vol. 12, p. 275-444.
134. Nika D. et al. Suppression of phonon heat conduction in cross-section modulated nanowires. In: Physical Review B, 2012, vol. 85, p. 205439-1-10.
135. Nika D. et al. Thermal conductivity inhibition in phonon engineered core-shell cross-section modulated Si/Ge nanowires. In: Applied Physics Letters, 2013, vol. 102, p. 213109.
136. Giannozzi P. et al. Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. In: Physical Review B, 1991, vol. 43, p. 7231-7242.
137. Nilsson G., Nelin G. Phonon dispersion relations in Ge at 80 K. In: Physical Review B, 1971, vol. 3, p. 364-369.
138. Srivastava G. The physics of phonons. Bristol: Taylor and Francis, 1990.
139. Mingo N. et al. Predicting the thermal conductivity of Si and Ge nanowires. In: Nano Letters, 2003, vol. 3, p. 1713.
140. Havener R. W. et al. Raman spectroscopy in graphene-based systems: prototypes for nanoscience and nanometrology. In: Nano Letters, 2012, vol. 12, p. 3162-3167.
141. Lu C.-C. et al. Twisting bilayer graphene superlattices. In: ACS Nano, 2013, vol. 7, p. 2587-2594.
142. Efros A. , Rosen M. The electronic structure of semiconductor nanocrystals. In: Annual Review of Materials Sciences, 2000, vol. 30, p. 475-521.
143. Pavlenko V., Dobinda I., Belousov I. On the determination of quantum dot size by spectroscopic methods. In: Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2014, vol. 9, p. 312-315.
144. Ridley B., Foutz B., Eastman L. Mobility of electrons in bulk GaN and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  heterostructures. In: Physical Review B, 2000, vol. 61, p. 16862-16869.
145. Anderson D. et al. Polar-optical phonon-limited transport in degenerate GaN-based quantum wells. In: Physical Review B, 2001, vol. 63, p. 245313-1-7.
146. Bannov N. et al. Electron relaxation times due to the deformation-potential interaction of electrons with confined acoustic phonons in a free-standing quantum well. In: Physical Review B, 1995, vol. 51, p. 9930-9942.
147. Ando T., Fowler A., Stern F. Electronic properties of two-dimensional systems. In: Review of Modern Physics, 1982, vol. 54, p. 437.
148. Lee B. et al. Optical-phonon confinement and scattering in wurtzite heterostructures. In: Physical Review B, 1998, vol. 58, p. 4860-4865.

149. See, for example, [www.sp3inc.com](http://www.sp3inc.com) (viewed on 10.03.2016).
150. Volz S., Chen G. Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of silicon nanowires. In: Applied Physics Letters, 1999, vol. 75, p. 2056.
151. Donadio D. and Galli G. Thermal conductivity of isolated and interacting carbon nanotubes: comparing results from molecular dynamics and the Boltzmann transport equation. In: Physical Review Letters, 2009, vol. 99, p. 255502.
152. Mingo N., Yang L. Phonon transport in nanowires coated with an amorphous material: An atomistic Green's function approach. In: Physical Review B, 2003, vol. 68, p. 245406.
153. Qiu B., Ruan X. Molecular dynamics simulation of lattice thermal conductivity of bismuth telluride using two-body interatomic potentials. In: Physical Review B, 2009, vol. 80, p. 165203.
154. Ladd A., Moran B., Hoover W. Lattice thermal conductivity: A comparison of molecular dynamics and anharmonic lattice dynamics. In: Physical Review B, 1986, vol. 34, p. 5058.
155. Ward A., Broido D. Intrinsic phonon relaxation times from first-principles studies of the thermal conductivities of Si and Ge. In: Physical Review B, 2010, vol. 81, p. 085205.
156. Crismari D., Nika D. Thermal conductivity reduction in Si/Ge core/shell nanowires. In: Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2012, vol. 7, p. 701.
157. Yang N., Zhang G, Li B. Ultralow thermal conductivity of isotope-doped silicon nanowires. In: Nano Letters, 2008, vol. 8, p. 276.
158. Dames C., Chen G. Theoretical phonon thermal conductivity of Si-Ge superlattice nanowires. In: Journal of Applied Physics, 2004, vol. 95, p. 682.
159. Pernot G. et al. Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers. In: Nature Materials, 2010, vol. 9, p. 491.
160. Ghosh S. et al. Heat conduction in graphene: experimental study and theoretical interpretation. In: New Journal of Physics, 2009, vol. 11, p. 095012.
161. Nika D., Cocemasov A., Balandin A. Specific heat of twisted bilayer graphene: engineering phonons by atomic plane rotations. In: Applied Physics Letters, 2014, vol. 105, p. 031904.
162. Mohr M. et al. Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering. In: Physical Review B, 2007, vol. 76, p. 035439.
163. Lopes dos Santos J., Peres N., Castro Neto A. Graphene bilayer with a twist: electronic structure. In: Physical Review Letters, 2007, vol. 99, p. 256802.


164. Poncharal P. et al. Raman spectra of misoriented bilayer graphene. In: *Physical Review B*, 2008, vol. 78, p. 113407.
165. Carozo V. et al. Raman signature of graphene superlattices. In: *Nano Letters*, 2011, vol. 11, p. 4527.
166. Hass J. et al. Why multilayer graphene on 4H-SiC(000 $\bar{1}$ ) behaves like a single sheet of graphene. In: *Physical Review Letters*, 2008, vol. 100, p. 125504.
167. Luican A. et al. Single-Layer Behavior and Its Breakdown in Twisted Graphene Layers. In: *Physical Review Letters*, 2011, vol. 106, p. 126802.
168. Saha S. et al. Phonons in few-layer graphene and interplanar interaction: A first principles study. In: *Physical Review B*, 2008, vol. 78, p. 165421.
169. Karssemeijer L. and Fasolino A. Phonons of graphene and graphitic materials derived from the empirical potential LCBOP-II. In: *Surface Science*, 2011, vol. 605, p. 1611.
170. Kim P. et al. Thermal transport measurement of individual multiwalled nanotubes. In: *Physical Review Letters*, 2011, vol. 87, p. 215502.
171. Saito K., Dhar A. Heat conduction in a three dimensional anharmonic crystal. In: *Physical Review Letters*, 2010, vol. 104, p. 040601.
172. Lippi A., Livi R. Heat conduction in two-dimensional nonlinear lattices. In: *Journal of Statistical Physics*, 2000, vol. 100, p. 1147.
173. Dhar A. Heat conduction in the disordered harmonic chain revisited. In: *Physical Review Letters*, 2001, vol. 86, p. 5882.
174. Ecsedy D., Klemens P. Thermal resistivity of dielectric crystals due to 4-phonon processes and optical modes. In: *Physical Review B*, 1977, vol. 15, p. 5957.
175. Mingo N., Broido D. Length dependence of carbon nanotube thermal conductivity and “the problem of long waves”. In: *Nano Letters*, 2005, vol. 5, 1221.
176. Klemens P. Thermal conductivity and lattice vibrational modes. In: *Solid State Physics*, 1958, vol. 7, p. 1.

## DECLARAȚIA PRIVIND ASUMAREA RĂSPUNDERII

Subsemnatul, declar pe răspundere personală că materialele prezentate în teza de doctor habilitat sunt rezultatul propriilor cercetări și realizări științifice. Conștientizez că, în caz contrar, urmează să suport consecințele în conformitate cu legislația în vigoare.

Nica Denis

Semnătura



Data: 12.04.2016

## CURRICULUM VITAE

Nume: Denis L. Nica  
Data nașterii: 15 aprilie, 1979  
Locul nașterii: Bender, Republica Moldova  
Starea civilă: Căsătorit  
Cetățenie: Republica Moldova  
Adresa: M. Costin str., 11/2, ap. 52, MD-2044, Chisinau, Moldova  
Telefoane de contact: (+373) 22 57 77 12, (+373) 22 57 75 83  
E-mail: [dlnika@yahoo.com](mailto:dlnika@yahoo.com)



### **Studii**

09/1986 – 06/1996 Liceul Teoretic №1, Bender, Moldova; Specialitatea: Fizica și matematică;  
09/1996 – 06/2001 Studii superioare, Facultatea de Fizică, Universitatea de Stat din Moldova;  
11/2001 – 10/2004 Doctorantura, Catedra „Fizica teoretică”, Universitatea de Stat din Moldova;  
04/2007 Doctor în științe fizico-matematice, specialitatea 01.04.02 – fizica teoretică și matematică.

### **Activitatea Profesională**

2012 – prezent Șeful Departamentului, Departament de Fizica Teoretică „Iu. Perlin”, Universitatea de Stat din Moldova;  
2012 – prezent Conducător științific al LCȘ „Fizica și ingineria nanomaterialelor „E. Pokatilov”, Universitatea de Stat din Moldova;  
2011 – 2012 Șeful LCȘ „Fizica și ingineria nanomaterialelor „E. Pokatilov”, Universitatea de Stat din Moldova;  
2008 – 2011 Șeful LCȘ „Fizica structurilor muștristratificate și magnetici moleculari”, Universitatea de Stat din Moldova;  
2008 – present Conferențiar cercetător, Facultatea de Fizica și Ingineria, Universitatea de Stat din Moldova;  
2006 – 2008 Colaboratorul științific superior, LCȘ „Fizica structurilor muștristratificate și magnetici moleculari”, Universitatea de Stat din Moldova;  
2004 – 2006 Colaboratorul științific, LCȘ „Fizica structurilor multistratificate și magnetici moleculari”, Universitatea de Stat din Moldova.



### **Deplasări Științifice peste Hotare**

Colaborator științific invitat (până la 3 luni):

- Nano-Device Laboratory, Universitatea din California – Riverside, Riverside, SUA: 2005, 2007, 2008, 2009, 2010, 2012, 2013, 2014, 2015, 2016;
- Institutul de Științe Nanointegrative, IFW, Dresda, Germania: Noiembrie-Decembrie, 2010;
- Universitatea de Stat din Moscova M.V. Lomonosov, Russia: 2007, 2008, 2009;
- Laboratorul TVFS, Universitatea din Anrwerpen, Antwerpen, Belgia: 2004, 2009.

**Domenii de Cercetare:** *Fizica corpului solid; Fizica computațională.*

### **Distincții**

- Tânărul Savant al Anului 2014;
- Premiul Academiei de Științe a Moldovei pentru tineri cercetători (2010, 2014);
- Laureatul Concursului al Țărilor CSI pentru tineri savanți „Содружество Дебютов” (2010);
- Tânărul Savant al Anului 2008 în domeniul științelor reale;
- Premiul Municipal pentru tineret în domeniile științei, tehnicii, literaturii și artelor (2006);
- Grantul Fundației CRDF-MRDA pentru deplasări în SUA oferit tinerilor cercetători din Moldova (2004) și Grantul “Follow-On” al Fundației CRDF-MRDA pentru investigarea proprietăților acustice ale nanostructurilor cuantice (2005).

**Participări la Proiecte și Granturi Internaționale:** Civilian Research and Development Foundation (CRDF) Projects: CRDF *MP2-2281* (executant, 2001-2002); CRDF *MOE2-2679-CS-05* (executant, 2005-2007); Moldovan Research and Development Association (MRDA) Projects: MRDA *MP-3044* (executant principal, 2003-2004); MRDA *MTFP-04-06* (conducător proiectului, 2005); MRDA *MTFP-04-06 Follow-On Award* (conducător al proiectului, 2005-2006); MRDA *MOE2-3057-CS-03* (executant principal, 2005-2007); INTAS Award no. *05-104-7656* (executant principal, 2006-2008); Bilateral projects between Republic of Moldova and Russian Federation: no. 06.35.CRF (executant principal, 2006-2007) and no. 08.820.05.29RF (executant principal, 2008-2009); Bilateral project between Republic of Moldova and Germany: no. 08.820.05.02GA (executant principal, 2010); Moldova-STCU 14.820.18.02.012 STCU.A/5937 (conducător al proiectului, 2014-2015).

**Participări la Proiecte și Granturi Naționale:** no. *11.817.05.10F* (conducător al proiectului, 2011-2014); no. *12.819.05.18F* (conducător al proiectului, 2012-2013); no. *06.408.036F*

(executant principal, 2006-2010); no. **10.819.05.02F** (conducător al proiectului, 2010-2011), no. **15.817.02.29F** (conducător al proiectului, 2015 – prezent); no. **14.819.02.13F** (conducător al proiectului, 2014-2015);

**Publicatii:** **85** de articole științifice și **130** de teze la conferințe internaționale și naționale. Indexul de citare = 2750 (ISI Web of Science, February 2016). H-Index = 24 (ISI Web of Science, February 2016).

**Participări la Foruri Științifice:** Nanoscience and nanotechnology for next generation - Nanong 2014, Elazig, Turkey (2014); 12th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems (ITherm), Las-Vegas, Nevada (2010); MRS Spring Meetings, San-Francisco, USA (2010); APS Spring Meetings, Oregon, USA (2010); Modern Information and Electronic Technologies, Odesa, Ukraine (2009, 2012, 2013, 2014); DPG Spring Meeting, Dresden, Germany (2012, 2014); The New Diamonds and Nano Carbons Conference, Austin, USA (2009); Electronic Materials Conference, Pennsylvania, USA (2009); Electronic Materials Conference, Santa-Barbara, USA (2008); XI-th International Young Scientists' Conference on Applied Physics, Kyiv (2011); The Russia-Germany Solid-State Physics Conference, Astrakhan, Russia (2009); Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, Rome, Italy (2008); 8th International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON'08), Kyoto, Japan (2008); 9-th European Conference on Thermoelectrics, Thessaloniki, Greece (2011); CECAM-Workshop: Nanophononics, Bremen, Germany (2013); 2012 EMN Open Access Week, Chengdu, China (2012); International Conference on Material Sciences and Condensed Matter Physics, Chisinau, Moldova (2006, 2010); Conference of Moldovan Physicists, Moldova (2007, 2012); International Conference of Young Researchers, Chisinau, Republic of Moldova (2007, 2008, 2009, 2010, 2011 and 2012); International Conference on Telecommunications, Electronics and Informatics – ICTEI (2008, 2012); International Conference on “Microelectronics and Computer Science”, Moldova (2007); International Conference “Physics of Low-Dimensional Structures”, Chisinau, Moldova (2007).

**Cunoașterea limbilor:** Rusă (maternă), Română (bine), Engleză (bine).

## PUBLICAȚIILE LA TEMATICA TEZEI

### Monografii:

1. **NIKA, D.L.** Phonon Engineering in Graphene and Semiconductor Nanostructures. In: CEP USM, 2015, 183 p.

### Capitole în Monografii

2. BALANDIN, A. A.; **NIKA, D. L.** Graphene and Graphene Multilayers: Phonon Thermal Transport. In: Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Third Edition. CRC Press: New York, 2014, pp. 1668–1684.
3. BALANDIN, A.A.; **NIKA, D.L.** Thermal properties of graphene: applications in thermal management. In: Innovative Graphene Technologies: Evaluation and Applications, Volume 2. “Smithers Rapra”, 2013. pp. 265-292.

### Articole de sinteză în reviste internaționale cotate ISI și Scopus

4. BALANDIN, A.A.; and **NIKA, D.L.** Phononics in low-dimensional materials. In: Materials Today, 2012, vol. 15, 266-275.
5. **NIKA, D.L.**; and BALANDIN, A.A. Two-dimensional phonon transport in graphene. In: Journal of Physics: Condensed Matter, 2012, vol. 24, 233203.
6. GOSH, S.; **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P. Heat conduction in graphene: experimental study and theoretical interpretation. In: New Journal of Physics, 2009, vol. 11, 095012.
7. BALANDIN, A.A.; POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.** Phonon Engineering in Hetero- and Nanostructures. In: Journal of Nanoelectronics and Optoinformatics, 2007, vol. 2, pp. 140-170.
8. YAN, Zh.; **NIKA D.L.**; BALANDIN, A.A. Thermal Properties of Graphene and Few-Layer Graphene: Applications in Electronics. In: IET Circuits, Devices & Systems. 2015, Vol. 9, pp. 4-12.
9. RENTERIA, J.D.; **NIKA, D.L.**; BALANDIN, A.A. Graphene thermal properties: applications in thermal management and energy storage. In: Applied Sciences, 2014, 4, 525 – 547.

### Articole în reviste internaționale cotate ISI și Scopus

10. GOSH, S.; BAO, W.; **NIKA, D.L.**; SUBRINA, S.; POKATILOV, E.P.; LAU, C.N, BALANDIN, A.A. Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene. In: Nature Materials, 2010, vol. 9, p. 555–558.
11. **NIKA, D.L.**; ASKEROV A.S.; and BALANDIN, A.A. Anomalous Size Dependence of the Thermal Conductivity of Graphene Ribbons. In: Nano Letters, 2012, vol. 12, 3238-3244.
12. MALEKPOUR, H.; CHUNG, K.H.; CHEN, J.C.; LU, C.Y.; **NIKA D.L.**; NOVOSELOV, K.S.; BALANDIN, A.A. Thermal Conductivity of Graphene Laminate. In: Nano Letters. 2014, 14, 5155–5161.
13. COCEMASOV, A.I.; **NIKA, D.L.**; BALANDIN, A.A. Engineering of thermodynamic properties of bilayer graphene by atomic plane rotations: the role of the out-of-plane phonons. In: Nanoscale. 2015, 7, 12851 – 12859.
14. LI, H.; YING, H.; CHEN, X.; **NIKA, D.L.**; COCEMASOV, A.I.; CAI, W.; BALANDIN, A.A.; CHEN, S. Thermal Conductivity of Twisted Bilayer Graphene. In: Nanoscale. 2014, 6, 13402 – 13408.
15. **NIKA, D.L.**; COCEMASOV, A.I.; ISACOVA A.I.; BALANDIN, A.A.; FOMIN, V.M.; SCHMIDT, O.G. Suppression of phonon heat conduction in cross-section modulated nanowires. In: Physical Review B, 2012, vol. 85, 205439.

16. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, EP.; BALANDIN, AA.; FOMIN, VM.; RASTELLI, A.; SCHMIDT, OG. Reduction of lattice thermal conductivity in one-dimensional quantum-dot superlattices due to phonon filtering. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, p. 165415.
17. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P.; ASKEROV, A.S.; BALANDIN, A.A. Phonon thermal conduction in graphene: role of Umklapp and edge roughness scattering. In: *Physical Review B*, 2009, vol. 79, p. 155413-1 – 155413-12 (Editor Suggestions).
18. COCEMASOV, A.I.; **NIKA, D.L.**; BALANDIN, A.A. Phonons in twisted bilayer graphene. In: *Physical Review B*. 2013, vol. 88, 035428.
19. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; FOMIN, V.M.; DEVREESE, J.T. Excitons in wurtzite AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> quantum-well heterostructures. In: *Physical Review B*, 2008, vol. 77, p. 125328.
20. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P.; SHAO, Q.; BALANDIN, A.A. Charge-carrier states and light absorption in ordered quantum dots superlattices. In: *Physical Review B*, 2007, vol. 76, p. 125417.
21. COCEMASOV, A.I.; **NIKA, D.L.**; FOMIN, V.M.; GRIMM, D. and SCHMIDT, O.G. Phonon-engineered thermal transport in Si wires with constant and periodically modulated cross-sections: A crossover between nano- and microscale regimes. In: *Applied Physics Letters*, 2015, 107, 011904 .
22. **NIKA, D.L.**; COCEMASOV, A.I.; BALANDIN, A.A. Specific heat of twisted bilayer graphene: Engineering phonons by atomic plane rotations. In: *Applied Physics Letters*, 2014, 105, 031904.
23. **NIKA, D.L.**; COCEMASOV, A.I.; CRISMARI, D.V; BALANDIN, A.A. Thermal Conductivity Inhibition in Phonon Engineered Core-Shell Cross-Section Modulated Si/Ge Nanowires. In: *Applied Physics Letters*, 2013, 102, 213109.
24. **NIKA, D.L.**, GOSH, S., POKATILOV, E.P., BALANDIN, A.A. Lattice thermal conductivity of graphene flakes: Comparison with bulk graphite. In: *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 94, p. 203103.
25. GOYAL, V., SUBRINA, S., **NIKA, D.L.**, BALANDIN, A.A. Reduced thermal resistance of silicon – synthetic diamond composite substrates at elevated temperatures. In: *Applied Physics Letters*, 2010, vol. 97, p. 031904.
26. GHOSH, S., CALIZO, I., TEWELDEBRHAN, D., **NIKA, D.L.**, POKATILOV, E.P., BALANDIN, A.A., BAO, W., MIAO, F., LAU, C.N. Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits. In: *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 92, p. 151911.
27. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P.; BALANDIN, A.A. Phonon-engineered mobility enhancement in the acoustically mismatched silicon/diamond transistor channels. In: *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 93, p. 173111.
28. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; BALANDIN, A.A. Built-in field effect on the electron mobility in AlN/GaN/AlN quantum wells. In: *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 89, p. 113508.
29. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; BALANDIN, A.A. Electron mobility enhancement in AlN/GaN/AlN heterostructures with InGaN nanogrooves. In: *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 89, p.112110.
30. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; ASKEROV, A.S.; BALANDIN, A.A. Size-quantized oscillations of the electron mobility limited by the optical and confined acoustic phonons in the nanoscale heterostructures. In: *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 102, 054304.
31. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, EP.; BALANDIN, AA. Theoretical description of thermal transport in graphene: The issue of phonon cut-off frequencies and polarization branches. In: *Physica Status Solidi B*, 2011, vol. 248, No. 11, p. 2609-2614.

32. **NIKA, D.L.** A special issue on Physical Properties and Applications of Nanostructures. In: Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2011, vol. 6, p.379-380.
33. **NIKA, D.L.**, ZINCENCO, N.D, POKATILOV, E.P. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures. In: Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. 2009, vol. 4, p. 180-185.
34. **NIKA, D.L.**, ZINCENCO, N.D, POKATILOV, E.P. Lattice thermal conductivity of ultra-thin freestanding layers: face-centered cubic cell model versus continuum approach. In: Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2009, vol. 4, p. 170-173.
35. BALANDIN, A.A., GOSH, S., **NIKA, D.L.**, POKATILOV, E.P. Thermal conduction in suspended graphene layers. In: Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2010, vol. 18, p. 474 – 486.
36. BALANDIN, A.A.; GOSH, S.; **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P. Extraordinary thermal conductivity of graphene: possible applications in thermal management. In: ECS Transaction, 2010, vol. 28, no. 5, p. 63–71.
37. **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P. ; BALANDIN, A.A. Theoretical description of thermal transport in graphene: The issue of phonon cut-off frequencies and polarization branches. In: Physica Status Solidi C, 2011, vol. 247, no. 11, p. 2609–2614.
38. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; FOMIN, V.M.; DEVREESE, J.T. Nonadiabatic theory of excitons in wurtzite AlGaN/GaN quantum-well heterostructures. In: Physica Status Solidi C, 2009, vol. 6, 46-49.
39. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; ZINCENCO, N.D.; BALANDIN, A.A. Electron – polar optical phonon scattering suppression and mobility enhancement in wurtzite heterostructures. In: Journal of Physics: Conference Series, 2007, 92, 012050.
40. ZINCENCO, N.D.; **NIKA, D.L.**; POKATILOV, E.P.; BALANDIN, A.A. Acoustic phonon engineering of thermal properties of silicon-based nanostructures. In: Journal of Physics: Conference Series, 2007, vol. 92, 012086.
41. POKATILOV, E.P.; **NIKA, D.L.**; ASKEROV, A.S.; BALANDIN, A.A. The size-quantized oscillations of the optical-phonon-limited mobility in AlN/GaN/AlN nanoscale heterostructures. In: Journal of Physics: Conference Series, 2007, vol. 92, 012022.
42. FOMIN V.M.; **NIKA D.L.**; COCEMASOV A.S.; ISACOVA C.I.; SCHMIDT O.G. Strong reduction of the lattice thermal conductivity in superlattices and quantum dot superlattices. In: AIP Conference Proceedings, 2012, vol. 1449, 33-36.

**Articole în reviste naționale**

43. **NIKA, D.L.**; ZINCENCO, N.D.; AL-SABAYLEH M. Acoustical properties of rectangular quantum wires covered by elastically dissimilar barriers with clamped outer surfaces. In: Moldavian Journal of the Physical Sciences, 2006, vol. 5, p. 103-112.
44. **НИКА, Д.** Акустические фононы и теплопроводность: переход от объемных материалов к наноструктурам. In: Studia Universitatis. Seria științe exacte și economie. 2011, nr. 7(47), p. 73-78
45. КОЧЕМАСОВ, А.; **НИКА, Д.** Динамическая теория колебаний кристаллической решетки типа алмаза. In: Studia Universitatis. Seria științe exacte și economie. 2011, nr. 7(47), p. 79-87.
46. КЛЮКАНОВ, А.; КОЧЕМАСОВ, А.; **НИКА, Д.** Приближение решеточных сумм в динамике кристаллов. Studia Universitatis, Seria “Științe Exacte și Economice”. 2014, nr.2 (72), p. 73-77.
47. **НИКА, Д.Л.**; ЗИНЧЕНКО, Н.Д.; ПОКАТИЛОВ, Е.П. Инженерия тепловых потоков в плоских наноструктурах. In: Studia Universitatis, Seria “Științe ale naturii”, 2009, nr.1(21), p. 172-175.

48. ИСАКОВА, К.; НИКА, Д.; ПОКАТИЛОВ, Е. Экситонные состояния в квантовых точках Si/SiO<sub>2</sub>. In: Studia Universitatis, Seria „Științe ale naturii”, 2008, nr. 2(12), p. 232-236.
49. НИКА Д.; ПОКАТИЛОВ Е., ЗИНЧЕНКО Н. Акустические фононы в Si/Ge супра – кристалле. In: Studia Universitatis, Seria „Științe ale naturii”, 2008, nr. 2(12), p. 225 – 229.
50. АСКЕРОВ, А.; ПОКАТИЛОВ, Е.; НИКА, Д. Размерно-квантованные осцилляции подвижности электронов, обусловленные взаимодействием с полярными оптическими фононами. In: Studia Universitatis, Seria „Științe ale naturii”, 2007, nr. 7, p. 249-251.
51. ЗИНЧЕНКО, Н.; НИКА, Д.; ПОКАТИЛОВ, Е. Динамическая модель колебаний решётки в квантовых прямоугольных нитях. In: Studia Universitatis, Seria „Științe ale naturii”. 2007, nr. 7, p. 269-273.
52. ИСАКОВА, К.; НИКА, Д.; АСКЕРОВ, А.; ЗИНЧЕНКО, Н.; ПОКАТИЛОВ, Е. Исследование кулоновского взаимодействия в квантовой точке Si/SiO<sub>2</sub>. In: Studia Universitatis, Seria „Științe ale naturii”, 2007, nr. 7, p. 280-284.
53. НИКА, Д.Л.; ПОКАТИЛОВ, Е.П.; БАЛАНДИН, А.А. Акустические фононы в Si/Ge/Si гетероструктурах: сравнение динамической “FCC” модели и континуального приближения. In: Analele Științifice ale Universității de Stat din Moldova, Seria “Științe fizico-matematice”, 2006, p. 82-88.
54. NICA, D. Ingineria fononică și conductibilitatea termică de rețea în nanostructurile multistratificate și în grafen. In: Akademos, 2011, nr. 2(21), p. 105-108.

**Teze la foruri științifice:** circa 100 teze au fost publicate în Conference Proceedings / Abstract Books

**Rapoartele invitate/plenare:**

1. “Phonon engineered thermal conductivity in graphene”. *Nanoscience and nanotechnology for next generation- Nanong 2014*, 20-22 August, 2014, Elazig, Turkey;
2. “Phonon engineering in multilayered nanostructures and graphene”, **13-th International Conference "Modern Information And Electronic Technologies"**, Odessa, Ukraine, 4—8 June, 2012;
3. “Phonon engineering in multilayered nanostructures and graphene”, *Materials Science & Engineering Colloquium*, University of California – Riverside, Department of Electrical Engineering, Riverside, USA, 3 April, 2012;
4. “Phonon engineering in nanostructures”, Invited Talk, *Institute of Integrative Nanosciences*, Dresden, Germany, 5 December, 2010;
5. “Thermal conductivity of graphene and few-layer graphene”, *5th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics*, 13–17 September, 2010, Chișinău, Republica Moldova;
6. “Development of the valence force field model for the phonons in planar nanoheterostructures”, *Conferința Fizicienilor Moldovei*, 11-12 October, 2007, Chișinău, Republica Moldova;
7. “The influence of the built-in electric field on the electron mobility limited by the optical phonons in AlN/GaN/AlN heterostructures”, *3rd International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics*, Chisinau, 3-6 October 2006.

**Rapoartele orale:**

1. Фоновая инженерия в графене. *15-ая Международную научно-практическую конференцию «Современные информационные и электронные технологии»*, Одесса, Украина, 26-30 Мая, 2014, p. 86-88.

2. Фононная теплопроводность графеновых лент. **14-ая Международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии»**, Одесса, Украина. Май, 27-31, 2013, p. 133-134.
3. Electron and hole states in quantum dots: shape and size effects. *Second Annual International Conference of Young Scientists “Computer Science and Engineering - 2007”*, Conference Proceedings, 4-6 October, 2007, Lviv, Ukraine, p.137-139.
4. Phonon engineered suppression of lattice thermal conductivity in segmented and cross-section modulated silicon nanowires. *The 4th International Conference on Telecommunications, Electronics and Informatics*, May 17-20, 2012, Chisinau, Moldova.
5. Фононная инженерия в графене. *Conferința științifică “Integrare prin cercetare și inovare”*, Chișinău, Republica Moldova, 10-11 noiembrie, 2014.
6. Решеточная теплопроводность прямоугольных графеновых лент: роль Умклапп и поверхностного рассеяния фононов. *Conferința științifică “Interferențe universitare - integrare prin cercetare și inovare”*, Chișinău, Republica Moldova, 25-26 septembrie, 2012.
7. Phonon thermal conductivity inhibition in cross-section-modulated Si/Ge nanowires. *Conferința științifică “Integrare prin cercetare și inovare”*, Chișinău, Republica Moldova, 26-28 septembrie 2013. Rezumate ale comunicărilor, p.100.
8. Phonon transport in amorphous silicon nanowires. *Conferința științifică “Integrare prin cercetare și inovare”*, Chișinău, Republica Moldova, 26-28 septembrie 2013.
9. Acoustic phonons and non-monotonic size dependence of phonon thermal conductivity in graphene ribbons. *Conferința fizicienilor din Moldova*, 22-23 octombrie 2012, Universitatea de Stat "Alecru Russo", Bălți.
10. Electron and hole states in the quantum dots supra-crystals. *Conferința Fizicienilor Moldovei*, Chișinău, Republica Moldova, 11-12 octombrie, 2007.
11. Electron and hole states in Si quantum dots imbedded into dielectric medium: Role of the quantum dot shape and size. *Conferința Fizicienilor Moldovei*, Chișinău, Republica Moldova, 11-12 octombrie, 2007.
12. „Увеличение подвижности электрона во вьюрцитных плоских гетероструктурах AlN/GaN/AlN”, *International Conference of Young Researchers*, 6-7 November, 2008, Chisinau, Republic of Moldova.
13. „Electron and hole states in Si quantum dots”, *5<sup>th</sup> International Conference on “Microelectronics and Computer Science”*, 19-21 September, 2007, Chisinau, Moldova.
14. „Electron and hole states in quantum dots: shape and size effects,„ *Second Annual International Conference of Young Scientists “Computer Science and Engineering - 2007”*.
15. „Влияние встроенного электрического поля на оптическую подвижность во вьюрцитных гетероструктурах”, *Conferința științifică internațională “Învățământul superior și cercetarea – piloni ai societății bazate pe cunoaștere”*, USM, 28 septembrie, 2006.
16. Electron and hole states in the quantum dots supra-crystals. *Conferința Fizicienilor Moldovei*, 11-12 October, 2007, Chișinău, Republica Moldova.
17. “Charge-carriers states in Si quantum dots with rectangular, conical and tetrahedral shapes”, *International Conference of Young Researchers*, 9 November, 2007, Chișinău, Republica Moldova.
18. „Акустические фононы в Si/Ge/Si гетероструктурах: сравнение “FCC” динамической модели и континуального приближения”, *International Conference of Young Researchers*, 10 November, 2006, Chișinău, Republica Moldova.
19. „Подавление взаимодействия электрона с полярными оптическими фононами и увеличение подвижности во вьюрцитных гетероструктурах”, *International Conference*

**“Physics of Low-Dimensional *Structures*”**, 27-28 June, 2007, Chişinău, Republica Moldova.



**NICA DENIS**

**INGINERIA FONONICĂ ÎN STRUCTURILE  
NANODIMENSIONALE**

**131.04 – FIZICA COMPUTAȚIONALĂ ȘI MODELAREA PROCESELOR**

Referatul științific  
al tezei de doctor habilitat în științe fizice în baza lucrărilor publicate

---

Aprobat spre tipar: 07.04.2016

Hîrtie ofset. Tipar ofset.

Coli de tipar: 5,75

Formatul hîrtiei 60x84 1/16

Tiraj 50 ex.

Comanda nr. 47/15

---

Centrul Editorial-Poligrafic al USM,  
str. A. Mateevici 60, MD-2009, Chișinău