

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ТИПА АЛМАЗА

Александр КОЧЕМАСОВ, Денис НИКА

Кафедра теоретической физики

Лаборатория физики и инженерии наноматериалов и синергетики им. Е.П. Показилова.

În acest articol am dezvoltat modelul bi-parametric al dinamicii rețelei cristaline pentru materialele volumetrice cu rețea cristalină de tip „diamant” (ca a siliciului sau a germaniului). Prin compararea dispersiilor teoretice și experimentale ale energiei fononilor am determinat parametrii modelului dezvoltat pentru siliciu și germaniu volumetric. În cadrul modelului dat am cercetat proprietățile fononice și transportul termic în siliciu și germaniu volumetric și am obținut coeficientul de conductibilitate termică în acord perfect cu datele experimentale într-un diapazon larg de temperatură (de la 80 până la 500 K).

In this paper we have developed two-parametric model of lattice dynamics for bulk materials with diamond-type crystal lattices (like as Si or Ge). The parameters of the model were determined from the comparison between theoretical and experimental phonon energy dispersions for bulk Si and Ge. In the framework of developed model we have investigated the phonon properties and thermal transport in bulk Si and Ge and have obtained the thermal conductivity in a good agreement with experimental data in a wide range of the temperatures 80 – 500 K.

Введение

Технологические успехи в изготовлении наноразмерных структур, достигнутые в последнее десятилетие, стимулируют во всем мире теоретические и экспериментальные исследования их физических свойств и поиск новых способов их улучшения [1-6]. Одной из основных причин, ограничивающих в данное время развитие нанoeлектроники, является недостаточный отвод тепла от горячих точек современных чипов, что вызывает перегрев чипа и, соответственно, ухудшение его рабочих характеристик и надежности [1-2]. Основными переносчиками тепла в умеренно-легированных полупроводниковых материалах, таких как кремний или германий, составляющих основу современной микро- и нанoeлектроники, являются кванты колебаний кристаллической решетки – фононы. В настоящее время разработано большое число теоретических моделей, описывающих фононные состояния в наноструктурах: от континуальных моделей [1,4], в которых пренебрегается дискретностью строения вещества, до сложных “ab initio” динамических моделей колебаний кристаллической решетки [5-6], при которых учитывается ее реальное строение, упругие натяжения и релаксация. Основной проблемой, с которой сталкиваются исследователи при развитии динамических моделей колебаний кристаллической решетки, является поиск потенциалов взаимодействия между атомами и силовых констант межатомного взаимодействия. Обычно константы межатомных взаимодействий выступают в роли параметров, которые находятся из условия наилучшего воспроизведения теорией законов дисперсии фононов, полученных экспериментально.

В представленной работе мы развиваем двухпараметрическую динамическую модель колебаний кристаллической решетки, которая при относительной простоте реализации позволяет с достаточной точностью воспроизвести экспериментальные результаты.

Двухпараметрическая динамическая модель колебаний кристаллической решетки типа алмаза

Кристаллическая решетка кремния и германия (решетка типа алмаза) состоит из двух гранецентрированных кубических подрешеток Бравэ, сдвинутых друг относительно друга вдоль кристаллографического направления симметрии [111] на вектор $\vec{R} = \frac{a}{4}(1,1,1)$, где a – постоянная решетки.

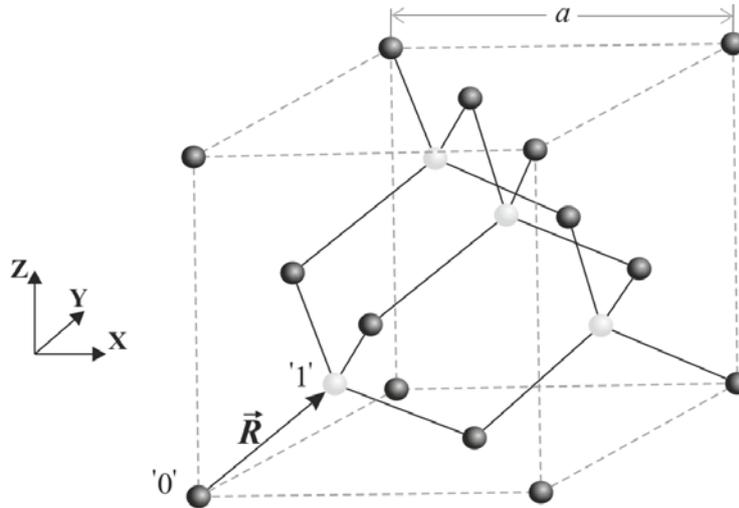


Рис.1. Кристаллическая решетка типа алмаза. Светлые и темные шары обозначают атомы, принадлежащие двум различным подрешеткам Бравэ.

Обозначим смещение μ -го атома m -ой ячейки в момент времени t как $\vec{u}^{\mu m}(t)$, а ее α -ую компоненту как $u_{\alpha}^{\mu m}(t)$. В гармоническом приближении (малые смещения из положения равновесия) потенциальная энергия решетки имеет вид [7]:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\mu, \nu} \sum_{m, n} \Phi_{\alpha\beta}^{\mu m, \nu n} u_{\alpha}^{\mu m}(t) u_{\beta}^{\nu n}(t), \quad (1)$$

где $\Phi_{\alpha\beta}^{\mu m, \nu n}$ – силовые константы взаимодействия между атомами μm и νn . Так как элементарная ячейка решетки типа алмаза содержит два атома (атомы '0' и '1' на рис.1.), то уравнения движения представляют собой систему из 6 дифференциальных уравнений второго порядка:

$$m_{\mu} \frac{d^2 u_{\alpha}^{\mu m}(t)}{dt^2} = - \sum_{\beta=x,y,z} \sum_{\nu=0,1} \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{\mu m, \nu n} u_{\beta}^{\nu n}(t), \quad \mu = 0, 1; \quad \alpha = x, y, z. \quad (2)$$

В силу трансляционной эквивалентности элементарных ячеек решение системы уравнений (2) будем искать в виде:

$$u_{\alpha}^{\mu m}(t) = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} U_{\alpha}^{\mu}(\vec{q}) \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm}) - \omega t], \quad (3)$$

где U_{α}^{μ} – компонента вектора амплитуд смещений атомов μ -го сорта, \vec{q} – волновой вектор, \vec{r}_{nm} – вектор-расстояние между соответствующими атомами одного сорта в ячейке n и ячейке m . Подставляя (3) в (2), получим систему уравнений относительно амплитуд смещений:

$$\begin{cases} \omega^2 U_{\alpha}^0(\vec{q}) = \sum_{\nu=0}^1 \frac{1}{\sqrt{m_0 m_{\nu}}} \sum_n \sum_{\beta} \Phi_{\alpha\beta}^{0m, \nu n} U_{\beta}^{\nu}(\vec{q}) \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})] \\ \omega^2 U_{\alpha}^1(\vec{q}) = \sum_{\nu=0}^1 \frac{1}{\sqrt{m_1 m_{\nu}}} \sum_n \sum_{\beta} \Phi_{\alpha\beta}^{1m, \nu n} U_{\beta}^{\nu}(\vec{q}) \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})] \end{cases} \quad (4)$$

В формулах (4) суммирование \sum_n ведется по всем ячейкам, включая ячейку $n = m$, для которой потенциалы взаимодействия $\Phi_{\alpha\beta}^{0m, 0m}$ и $\Phi_{\alpha\beta}^{1m, 1m}$ не определены. Их значения могут быть найдены из условия, что суммарная сила, действующая на выбранный атом со стороны всех других атомов, равна

нулю: $\sum_{\nu=0}^1 \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{0m,\nu n} = 0$ для атома $\mu = 0$ и $\sum_{\nu=0}^1 \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{1m,\nu n} = 0$ для атома $\mu = 1$. Таким образом, для искомых потенциалов получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\beta}^{0m,0m} &= -\sum_{n \neq m} \Phi_{\alpha\beta}^{0m,0n} - \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{0m,1n}, \\ \Phi_{\alpha\beta}^{1m,1m} &= -\sum_{n \neq m} \Phi_{\alpha\beta}^{1m,1n} - \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{1m,0n}. \end{aligned} \quad (5)$$

С учетом (5), (4) переписывается в виде:

$$\begin{cases} \omega^2 U_{\alpha}^0(\vec{q}) = \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}^{00}(\vec{q}) U_{\beta}^0(\vec{q}) + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}^{01}(\vec{q}) U_{\beta}^1(\vec{q}) \\ \omega^2 U_{\alpha}^1(\vec{q}) = \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}^{10}(\vec{q}) U_{\beta}^0(\vec{q}) + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}^{11}(\vec{q}) U_{\beta}^1(\vec{q}) \end{cases}, \quad (6)$$

где $D_{\alpha\beta}$ – коэффициенты динамической матрицы, определяемые выражениями:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{00}(\vec{q}) &= \frac{1}{m_0} \left\{ \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{0m,0n} (\text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})] - 1) - \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{0m,1n} \right\}, \\ D_{\alpha\beta}^{01}(\vec{q}) &= \frac{1}{\sqrt{m_0 m_1}} \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{0m,1n} \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})], \\ D_{\alpha\beta}^{10}(\vec{q}) &= \frac{1}{\sqrt{m_1 m_0}} \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{1m,0n} \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})], \\ D_{\alpha\beta}^{11}(\vec{q}) &= \frac{1}{m_1} \left\{ \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{1m,1n} (\text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{nm})] - 1) - \sum_n \Phi_{\alpha\beta}^{1m,0n} \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

В уравнениях (7) удобно перейти от суммирования по элементарным ячейкам к суммированию по наборам эквивалентных атомов (координационным сферам). Тогда (7) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{00}(\vec{q}) &= \frac{1}{m_0} \left\{ \sum_{k=0,2,4,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{0,k,s} (\text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{0,k,s})] - 1) - \sum_{k=1,3,5,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{0,k,s} \right\}, \\ D_{\alpha\beta}^{01}(\vec{q}) &= \frac{1}{\sqrt{m_0 m_1}} \sum_{k=1,3,5,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{0,k,s} \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{0,k,s})], \\ D_{\alpha\beta}^{10}(\vec{q}) &= \frac{1}{\sqrt{m_1 m_0}} \sum_{k=1,3,5,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{1,k,s} \text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{1,k,s})], \\ D_{\alpha\beta}^{11}(\vec{q}) &= \frac{1}{m_1} \left\{ \sum_{k=0,2,4,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{1,k,s} (\text{Exp}[\mathbf{i}(\vec{q}, \vec{r}_{1,k,s})] - 1) - \sum_{k=1,3,5,\dots} \sum_{s=1}^{N_k} \Phi_{\alpha\beta}^{1,k,s} \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

В (8) были введены следующие обозначения:

индексы k и s – нумеруют координационные сферы и атомы в координационных сферах соответственно,

N_k – число атомов на сфере k ,

$\Phi_{\alpha\beta}^{\nu,k,s}$ – потенциал взаимодействия между атомом ν и атомом s из сферы k ,

$\vec{r}_{\nu,k,s}$ – вектор-расстояние между атомом ν и атомом s из сферы k .

Из уравнений (8) видно, что вклады отдельных сфер взаимодействия в коэффициенты $D_{\alpha\beta}$ являются аддитивными и друг от друга не зависят, что позволяет рассматривать каждую координационную сферу в отдельности. Для описания основных особенностей фононных спектров кристаллов Si и Ge достаточно учесть взаимодействие атомов из двух ближайших координационных сфер [8].

Для определения радиус-векторов $\vec{r}_{v,k,s}$ сначала выпишем координационные векторы $\vec{h}^{v,k,s}$. Отметим, что $\vec{h}^{v,k,s}$ и $\vec{r}_{v,k,s}$ соединяют соответствующие атомы одного сорта. Как будет показано ниже, это легко позволяет выразить $\vec{r}_{v,k,s}$ через $\vec{h}^{v,k,s}$.

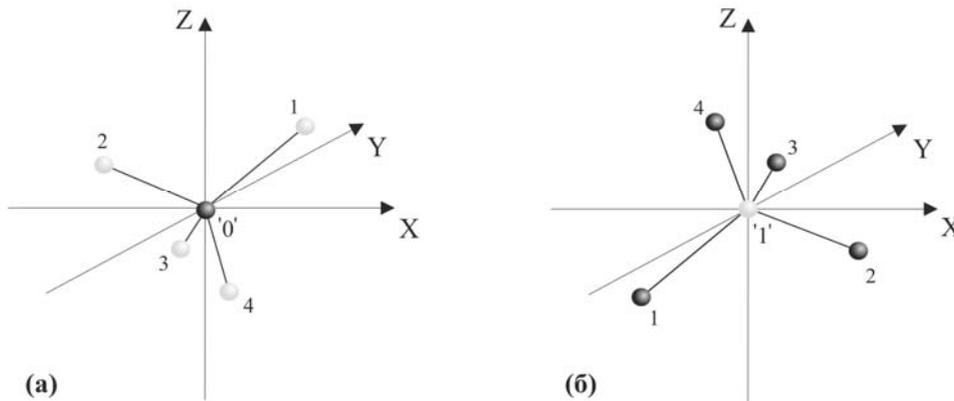


Рис.2. Пространственное расположение атомов первой координационной сферы: атома '0' (а) и атома '1' (б).

Четырем атомам первой сферы (рис.2.) соответствует следующий набор векторов $\vec{h}^{v,1,s}$:

$$\vec{h}^{0,1,1} = \frac{a}{4}(1,1,1); \vec{h}^{0,1,2} = \frac{a}{4}(-1,-1,1); \vec{h}^{0,1,3} = \frac{a}{4}(-1,1,-1); \vec{h}^{0,1,4} = \frac{a}{4}(1,-1,-1) \text{ - для атома '0';}$$

$$\vec{h}^{1,1,1} = \frac{a}{4}(-1,-1,-1); \vec{h}^{1,1,2} = \frac{a}{4}(1,1,-1); \vec{h}^{1,1,3} = \frac{a}{4}(1,-1,1); \vec{h}^{1,1,4} = \frac{a}{4}(-1,1,1) \text{ - для атома '1'}.$$

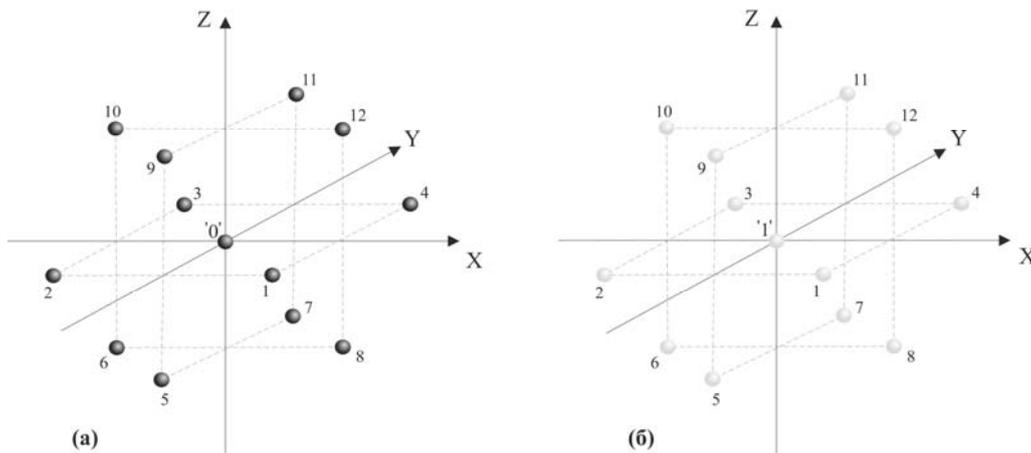


Рис.3. Пространственное расположение атомов второй координационной сферы: атома '0' (а) и атома '1' (б).

Двенадцати атомам второй сферы (рис.3.) соответствует следующий набор векторов $\vec{h}^{v,2,s}$:

$$\left[\begin{array}{l}
 \bar{h}^{0,2,1} = \frac{a}{2}(1, -1, 0); \bar{h}^{0,2,2} = \frac{a}{2}(-1, -1, 0); \bar{h}^{0,2,3} = \frac{a}{2}(-1, 1, 0); \bar{h}^{0,2,4} = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \\
 \bar{h}^{0,2,5} = \frac{a}{2}(0, -1, -1); \bar{h}^{0,2,6} = \frac{a}{2}(-1, 0, -1); \bar{h}^{0,2,7} = \frac{a}{2}(0, 1, -1); \bar{h}^{0,2,8} = \frac{a}{2}(1, 0, -1) \text{ - для атома '0';} \\
 \bar{h}^{0,2,9} = \frac{a}{2}(0, -1, 1); \bar{h}^{0,2,10} = \frac{a}{2}(-1, 0, 1); \bar{h}^{0,2,11} = \frac{a}{2}(0, 1, 1); \bar{h}^{0,2,12} = \frac{a}{2}(1, 0, 1) \\
 \bar{h}^{1,2,1} = \frac{a}{2}(1, -1, 0); \bar{h}^{1,2,2} = \frac{a}{2}(-1, -1, 0); \bar{h}^{1,2,3} = \frac{a}{2}(-1, 1, 0); \bar{h}^{1,2,4} = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \\
 \bar{h}^{1,2,5} = \frac{a}{2}(0, -1, -1); \bar{h}^{1,2,6} = \frac{a}{2}(-1, 0, -1); \bar{h}^{1,2,7} = \frac{a}{2}(0, 1, -1); \bar{h}^{1,2,8} = \frac{a}{2}(1, 0, -1) \text{ - для атома '1'.} \\
 \bar{h}^{1,2,9} = \frac{a}{2}(0, -1, 1); \bar{h}^{1,2,10} = \frac{a}{2}(-1, 0, 1); \bar{h}^{1,2,11} = \frac{a}{2}(0, 1, 1); \bar{h}^{1,2,12} = \frac{a}{2}(1, 0, 1)
 \end{array} \right.$$

Как видно из рис.3, пространственная конфигурация атомов второй сферы взаимодействия ‘0’-го и ‘1’-го атомов одинакова, поэтому наборы векторов $\bar{h}^{0,2,s}$ и $\bar{h}^{1,2,s}$ совпадают. Векторы $\vec{r}_{v,k,s}$ выражаются через $\bar{h}^{v,k,s}$ при помощи следующих соотношений:

$$\left[\begin{array}{l}
 \vec{r}_{0,1,s} = \bar{h}^{0,1,s} - \bar{R} \\
 \vec{r}_{1,1,s} = \bar{h}^{1,1,s} + \bar{R} \\
 \vec{r}_{0,2,s} = \bar{h}^{0,2,s} \\
 \vec{r}_{1,2,s} = \bar{h}^{1,2,s}
 \end{array} \right. \quad (9)$$

Векторы $\vec{r}_{v,k,s}$, определяемые соотношениями (9), направлены к атомам сорта v . Так как первая сфера атома ‘0’ (‘1’) состоит из атомов сорта ‘1’ (‘0’), а векторы $\vec{r}_{0(1),1,s}$ должны связывать атомы одной подрешетки, то от соответствующего координационного вектора $\bar{h}^{0(1),1,s}$ необходимо отнять (прибавить) вектор $\bar{R} = \frac{a}{4}(1,1,1)$, направленный от атома ‘0’ к атому ‘1’. В случае второй сферы, взаимодействующие атомы принадлежат одной подрешетке, поэтому векторы $\vec{r}_{v,2,s}$ совпадают с векторами $\bar{h}^{v,2,s}$.

Для расчета динамических коэффициентов (8) необходимо выбрать явный вид потенциалов межатомного взаимодействия. Наиболее общий подход заключается в задании потенциальной энергии $\Pi(r)$ взаимодействия между атомами как функции расстояния между ними, с последующим вычислением силовых постоянных по формуле $\Phi_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \Pi}{\partial r_\alpha \partial r_\beta}$ [9-11]. В случае достаточно сложных модельных потенциалов, число подгоночных параметров, входящих в функцию $\Pi(r)$, резко возрастает, а численный расчет силовых матриц становится ресурсоемкой задачей [12]. В нашей работе мы считаем потенциалы сферическими, что позволяет получить силовые матрицы в следующем явном виде:

$$\Phi_{\alpha\beta}^{v,k,s} = -c_k \frac{h_\alpha^{v,k,s} h_\beta^{v,k,s}}{|\bar{h}^{v,k,s}|}, \quad (10)$$

где c_k – силовая константа k -ой сферы взаимодействия.

Система уравнений (6) с коэффициентами (8) представляет собой задачу на собственные значения (ω) и собственные векторы (\vec{U}). Таким образом, используя условие обращения в нуль детерминанта системы (6) $|\omega^2(\vec{q})\delta_{\alpha\beta} - D_{\alpha\beta}(\vec{q})| = 0$, мы получили дисперсионные зависимости $\omega_s(\vec{q})$ (s – нумерует фоновые ветви). Расчет колебательных спектров проводился для объемных кристаллов Si и Ge в кристаллографических направлениях высокой симметрии: [100], [110] и [111]. Подгонка рассчитанных дисперсионных кривых к экспериментальным выполнялась соответствующей вариацией значений силовых постоянных c_k . В таблице 1 представлены параметры, дающие наилучшее согласие теоретических кривых фоновых дисперсий с экспериментальными.

Таблица 1

Силовые константы взаимодействия атомов двух ближайших координационных сфер в кристаллах Si и Ge

$c_1(Si)$, Н/м	$c_2(Si)$, Н/м	$c_1(Ge)$, Н/м	$c_2(Ge)$, Н/м
159.0	11.0	130.0	12.0

Используя дисперсионные кривые фононов, полученные в рамках развитой динамической модели, мы рассчитали коэффициент фоновой теплопроводности κ_{ph} . Направим тепловой поток вдоль оси X . В приближении времени релаксации коэффициент теплопроводности будет определяться согласно формуле [5]:

$$\kappa_{ph} = \frac{1}{V} \sum_s \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_s(\vec{q}) (v_s(\vec{q}))^2 \cos^2 \theta \tau_s(\vec{q}) \frac{\partial N_s(\vec{q})}{\partial T}. \quad (11)$$

Здесь V – объем кристалла, s – нумерует фоновые ветви, \vec{q} – трехмерный фоновый волновой вектор $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$, $v_s(\vec{q})$ – групповая скорость фонона, θ – угол между \vec{q} и осью X , $N_s(\vec{q})$ – равновесная функция распределения фононов. Суммирование $\sum_{\vec{q}}$ в формуле (11) проводится по первой зоне Бриллюэна. Перейдем в (11) от суммирования по \vec{q} к интегрированию по правилу:

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \iiint dq_x dq_y dq_z. \text{ Учитывая, что } \frac{\partial N_s(\vec{q})}{\partial T} = \frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T^2} \frac{\exp(\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T})}{(\exp(\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T}) - 1)^2}, \text{ получим:}$$

$$\kappa_{ph} = \frac{1}{(2\pi)^3 k_B T^2} \sum_s \iiint (\hbar \omega_s(\vec{q}))^2 (v_s(\vec{q}))^2 \cos^2 \theta \tau_s(\vec{q}) \frac{\exp(\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T})}{(\exp(\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T}) - 1)^2} dq_x dq_y dq_z. \quad (12)$$

В предположении, что частоты и скорости фононов не зависят от направления вектора \vec{q} , трехмерный интеграл в уравнении (12) можно переписать в сферической системе координат:

$$\iiint dq_x dq_y dq_z = \int_0^{q_{\max} = \frac{2\pi}{a}} q^2 dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta. \quad (13)$$

Учитывая (13), а также принимая во внимание, что $\int_0^{\pi} \sin \theta \cos^2 \theta d\theta = \frac{2}{3}$, для коэффициента теплопроводности объемного кристалла получим:

$$\kappa_{ph} = \frac{1}{6\pi^2 k_B T^2} \sum_s \int_0^{q_{\max}} (\hbar\omega_s(q))^2 (v_s(q))^2 \tau_s(q) \frac{\exp(\frac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T})}{(\exp(\frac{\hbar\omega_s(q)}{k_B T}) - 1)^2} q^2 dq. \quad (14)$$

При расчете времени релаксации фонона $\tau_s(q)$ мы учитывали основной механизм рассеяния фононов – 3-фононные Umklapp-процессы рассеяния, когда два фонона из одной зоны Бриллюэна сталкиваются с образованием третьего фонона в соседней зоне или фонон из одной зоны Бриллюэна распадается на 2 фонона из соседней зоны. В [13] показано, что скорость рассеяния в Umklapp-процессах может быть моделирована следующей формулой:

$$\tau_s^{-1}(q) = B \omega_s^2(q) \exp(-C/T), \quad (15)$$

где B и C – подгоночные параметры, значения которых для Si и Ge представлены в таблице 2, T – температура.

Таблица 2

Значения параметров Umklapp рассеяния в кристаллах Si и Ge

$B(Si), \text{с K}^{-1}$	$C(Si), \text{K}$	$B(Ge), \text{с K}^{-1}$	$C(Ge), \text{K}$
2.73×10^{-19}	137.4	4.7×10^{-19}	57.6

Фононные дисперсии энергий и теплопроводности в объемных кремнии и германии

На рис.4 представлены фононные дисперсионные кривые вдоль кристаллографических направлений [100], [110] и [111] в объемных кристаллах Si и Ge.

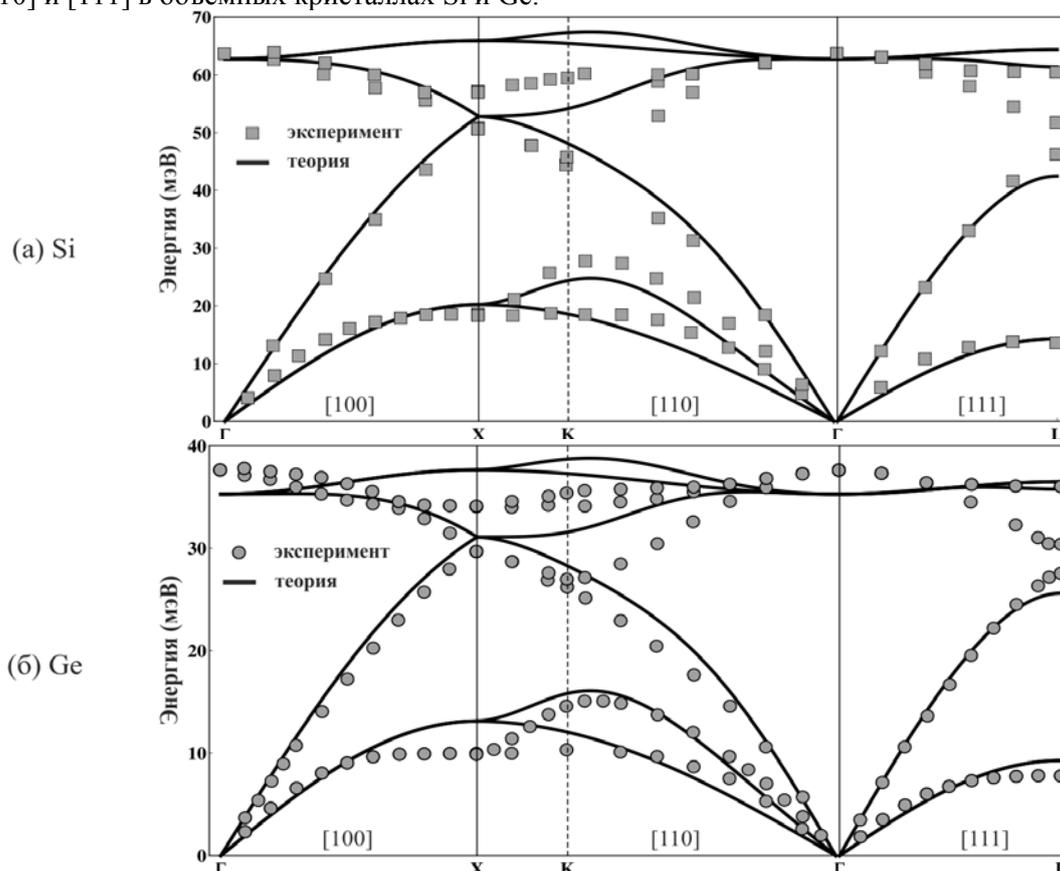


Рис.4. Фононные дисперсионные кривые вдоль направлений высокой симметрии для (а) объемного Si и (б) объемного Ge. Для сравнения также приведены дисперсионные кривые, полученные экспериментально в [14] для Si и в [15] для Ge. Точки высокой симметрии зоны Бриллюэна, отмеченные на графиках буквами Γ , X, K и L, имеют следующие координаты: $\Gamma = (0, 0, 0)$, $X = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$, $K = \frac{3\pi}{2a}(1, 1, 0)$, $L = \frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$.

Так как элементарные ячейки Si и Ge содержат по два атома, то число дисперсионных ветвей равно $3 \times 2 = 6$. Три нижайшие ветви соответствуют акустическим ветвям, а три высокоэнергетические – оптическим. Как видно из рис.4 теоретические кривые хорошо согласуются с экспериментальными кривыми для акустических ветвей. Для оптических ветвей согласие между теоретическими и экспериментальными данными хуже. Мы предполагаем, что это связано с использованием в развитой модели сферических потенциалов межатомного взаимодействия. Для более точного описания оптических ветвей колебаний необходимо использовать несферические потенциалы взаимодействия. Однако так как основными переносчиками тепла в полупроводниках в широком интервале температур являются акустические фононы, развитая в работе динамическая модель колебаний решетки является адекватной для описания теплопроводности.

Проведенный расчет теплопроводности объемных кремния (рис.6(a)) и германия (рис.6(б)) в интервале температур от 20 до 500K показал отличное согласие с экспериментом при $T > 80 K$ в Si и при $T > 50 K$ в Ge, что подтверждает

- 1) адекватность развитой динамической модели колебаний решетки для описания акустических и тепловых свойств кристаллов Si и Ge;
- 2) предположение о том, что 3-фононные Umklapp-процессы рассеяния в полупроводниках Si и Ge играют доминирующую роль в области средних и высоких температур.

Для теоретического воспроизведения низкотемпературной части графика теплопроводности необходимо включать дополнительные механизмы рассеяния фононов, такие как рассеяние на примесях и дислокациях, что выходит за рамки представленной работы.

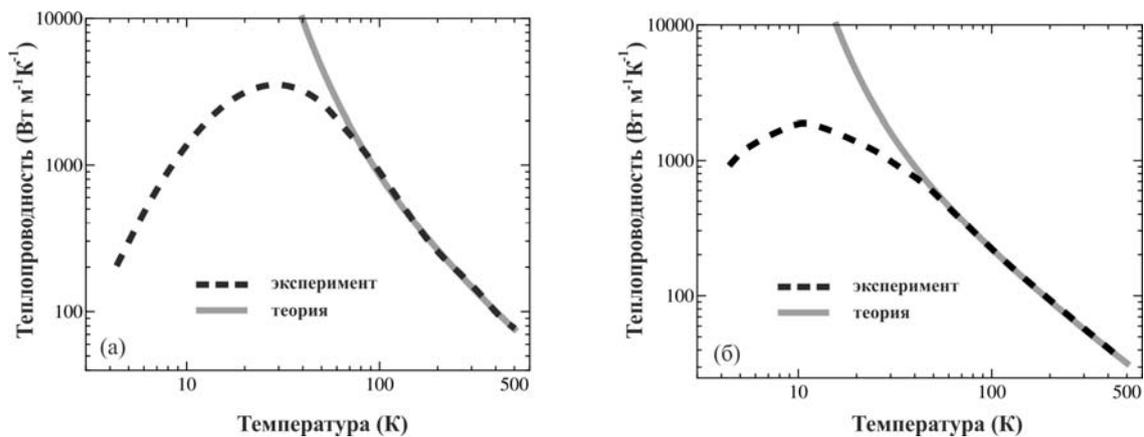


Рис.6. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности: (а) в объемном Si и (б) в объемном Ge. Для сравнения приведены экспериментальные кривые теплопроводности в Si и Ge, взятые из [16].

Выводы

В работе развита двухпараметрическая динамическая модель колебаний кристаллической решетки типа алмаза. Рассчитаны дисперсионные кривые фононов для объемных кристаллов Si и Ge в кристаллографических направлениях высокой симметрии: [100], [110] и [111]. Найдены силовые константы межатомного взаимодействия, которые в рамках развитой модели позволяют получить наилучшее сравнение с экспериментальными дисперсиями энергии акустических фононов. На базе полученных дисперсий энергии акустических и оптических фононов рассчитана решеточная теплопроводность объемных Si и Ge в широкой области температур. Полученные теоретические значения теплопроводности находятся в отличном согласии с экспериментальными в области средних и высоких температур.

Литература:

1. Balandin A., Nika D. and Pokatilov E. Phonon engineering in hetero- and nanostructures // J. Nanoelect. Optoelect., 2007, vol.2, p.140-170.
2. Kahil D. et al. Nanoscale thermal transport // J. Appl. Phys., 2003, vol.93, p.793-1-793-6.
3. Li D. et al. Thermal conductivity of Si/SiGe superlattice nanowires // Appl. Phys. Lett., 2003, vol.83, p.3186-1-3186-3.

4. Pokatilov E., Nika D. and Balandin A. A phonon depletion effect in ultrathin heterostructure with acoustically mismatched layers // Appl. Phys. Lett., 2004, vol.85, p.825-1-825-3.
5. Nika D., Pokatilov E., Askerov A. and Balandin A. Phonon thermal conduction in graphene: Role of Umklapp and edge roughness scattering // Phys. Rev. B., 2009, vol.79, p.155413-1-155413-12.
6. Ward A. and Broido D. Intrinsic phonon relaxation times from first-principles studies of the thermal conductivities of Si and Ge // Phys. Rev. B., 2010, vol.81, p.085205-1-085205-5.
7. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. - Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1978. - 618 с.
8. Keating P. Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure // Phys. Rev., 1966, vol.145, p.637-645.
9. Lennard-Jones J. On the determination of molecular fields // Proc. R. Soc. Lond. A., 1924, vol.106, p.463-477.
10. Stillinger F., Webber T. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // Phys. Rev. B., 1985, vol.31, p.5262-5271.
11. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B., 1988, vol.37, p.6991-7000.
12. Erkoç S. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties // Physics Reports., 1997, vol.278, p.79-105.
13. Mingo N. Predicting the thermal conductivity of Si and Ge nanowires // Nano Lett., 2003, vol.3, No.12, p.1713-1716.
14. Giannozzi P., de Gironcoli S., Pavone P., Baroni S. Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors // Physical Review B., 1991, vol.43, p.7231-7242.
15. Nilsson G., Nelin G. Phonon dispersion relations in Ge at 80 K // Physical Review B., 1971, vol.3, p.364-369.
16. Glassbrenner C., Slack G. Thermal conductivity of silicon and germanium from 3K to the melting point // Phys. Rev., 1964, vol.134, p.A1058-A1069.

Выражаем благодарность Академии наук Молдовы за финансовую поддержку проведенных исследований в рамках институционального проекта 11.817.03.10F и проекта для молодых ученых 10.819.05.02F.

Prezentat la 12.10.2011