

## ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОЛЕБАНИЙ РЕШЁТКИ В КВАНТОВЫХ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ НИТЯХ

*Надежда ЗИНЧЕНКО, Денис НИКА, Евгений ПОКАТИЛОВ*

*Кафедра теоретической физики*

În articol sunt prezentate rezultatele investigații proprietăților acustice ale heterofirelor și ale firelor omogene dreptunghiulare cuantice pe baza Si în cadrul modelului dinamic al rețelei cristaline. Au fost cercetate spectrele energetice și vitezele de grup în heterofirul Si/Ge. S-a făcut comparația cu firul omogen din Si. A fost realizată comparația cu rezultatele obținute în cadrul modelelor dinamic al rețelei cristalinei și continuă. S-a stabilit că abordarea continuă este aplicabilă la fononii acustici cu energie mică (valorile mici ale numărului de undă și ale numărului cuantic al fononului).

In the present paper the investigations of acoustic properties of quantum rectangular Si-based heterowires and homogeneous wires in the framework of Face-Centered Cell dynamic lattice model are presented. The energy spectra and group velocities in heterowires Si/Ge are examined. The comparison with Si wire is carried out. The comparison between the results obtained in the framework of dynamic model and continual approximation is realized. It was established that continual approach is applicable for acoustic phonons with small energies (small values of wave number and quantum number).

В конденсированных телах акустические фононы являются важными участниками процессов переноса энергии [1-2]. Величина акустического вклада сильно зависит от фононной дисперсии. В низкоразмерных структурах энергетический спектр акустических фононов значительно изменяется по сравнению со спектром в объёмных полупроводниках, что проявляется благодаря размерному квантованию энергии фононов, появлению большого числа квантованных фононных ветвей [3]. Для нахождения спектров акустических фононов в квантовых гетероструктурах нанометровых размеров (квантовые слои, нити, точки и сверхрешётки из них) широко используется континуальный подход [4-5], который в длинноволновом приближении (низкие энергетические ветви, малые значения волнового числа  $q$ ) даёт правильные дисперсионные зависимости. Для рассмотрения акустических фононов с малой длиной волны (высокие энергетические ветви, большие значения  $q$ ) континуальный подход непригоден. В этом случае возникает потребность использовать динамическую модель колебаний кристаллической решётки, имеющую смысл для всех длин волн [6-7].

В работе исследуются энергетические спектры и групповые скорости акустических фононов в квантовых прямоугольных однородных нитях и гетеронитях. В качестве параметров материала внутреннего слоя взяты параметры кремния. Выполнено сравнение результатов, полученных в рамках динамической модели и континуального приближения.

### **Теоретическая модель**

Характерной чертой динамической модели является использование силовых констант, описывающих взаимодействие атомов в кристаллической решётке. При небольшом числе используемых силовых констант их вычисляют из упругих модулей материалов. При некоторых допущениях относительно величины силовых констант, описывающих взаимодействие атомов на границах гетероструктуры, можно обобщить теорию гетероструктур из материалов с различными акустическими свойствами.

Кристаллическая решётка кремния представляет собой две кубические гранцентрированные решётки (FCC-face-centered cubic cell), смещённые друг относительно друга вдоль пространственной диагонали куба на  $1/4$  её длины. В настоящей работе используется следующее упрощение: FCC решётки совмещаются одна с другой. При этом в каждом узле решётки находятся атомы с удвоенной массой.

Схематичное изображение исследуемой прямоугольной гетеронити, а также однородной нити, представлено на рис.1. Оси  $X_1$  и  $X_2$  декартовой системы координат располагаются в плоскости поперечного сечения нити параллельно ее сторонам, а ось  $X_3$  направлена вдоль оси нити. Начало

координат находится в центре гетеронити. Длины сторон прямоугольной нити обозначены  $d_1^{(1)}$ ,  $d_2^{(1)}$ , длины внешних сторон нити –  $d_1$ ,  $d_2$ . В работе учитывается взаимодействие атома с двумя ближайшими атомными сферами. Взаимодействие с первой атомной сферой – центрально-симметрическое, т.е. описывается одной силовой константой  $\alpha_1$ . Взаимодействие со второй атомной сферой считается нецентрально-симметрическим и описывается двумя силовыми константами  $\alpha$  и  $\beta$ . При расчёте взаимодействия атома из материала (1) с атомом из материала (2) использовались усреднённые константы  $\alpha_1 = [\alpha_1(1) + \alpha_1(2)]/2$ ,  $\alpha = [\alpha(1) + \alpha(2)]/2$  и  $\beta = [\beta(1) + \beta(2)]/2$ . Силовые константы  $\alpha_1$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  выражаются через независимые модули упругости кубического кристалла  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  и  $c_{44}$  следующим образом:  $\alpha_1 = a(c_{12} + c_{44})/2$ ,  $\alpha = a(c_{11} - c_{12} - c_{44})/4$ ,  $\beta = a(c_{44} - c_{12})/8$ .

Система уравнений движения атомов имеет вид:

$$m(n)\omega^2 w_i(n, q) = \sum_{n'} D_{il}(n', n, q) w_l(n', q), \quad i = 1, 2, 3. \quad (1)$$

В уравнении (1)  $n$  нумерует атомные монослои рассматриваемой наноструктуры,  $q$  – это фоновый волновой вектор;  $\omega$  – фоновая частота;  $w_i(n, q)$  – амплитуды компонент вектора смещения;  $m(n)$  – масса узла решётки;  $D_{il}(n, n', q)$  – элементы динамической матрицы, описывающие взаимодействие атомов  $n$  и  $n'$  монослоев.

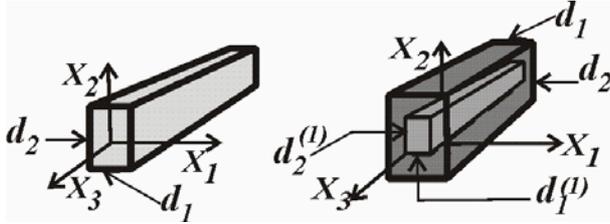


Рис.1. Схематическое изображение рассматриваемых прямоугольных квантовых нитей.

Рассматриваемая прямоугольная нить имеет две пространственные плоскости симметрии, пересечение которых образует ось нити. Из инвариантности системы уравнений по отношению к операции отражения в этих плоскостях следует 4 возможных типа решений [8]:

Dilatational:  $u_1^{AS}(x_1, x_2); u_2^{SA}(x_1, x_2); u_3^{SS}(x_1, x_2) \rightarrow u_i^D$ ;

Flexural<sub>1</sub>:  $u_1^{SS}(x_1, x_2); u_2^{AA}(x_1, x_2); u_3^{AS}(x_1, x_2) \rightarrow u_i^{F_1}$ ;

Flexural<sub>2</sub>:  $u_1^{AA}(x_1, x_2); u_2^{SS}(x_1, x_2); u_3^{SA}(x_1, x_2) \rightarrow u_i^{F_2}$  и

Shear:  $u_1^{SA}(x_1, x_2); u_2^{AS}(x_1, x_2); u_3^{AA}(x_1, x_2) \rightarrow u_i^{Sh}$ .

Здесь  $S(A)$  означает четность (нечетность) функции по отношению к операции обращения знака соответствующей переменной:

$$f(x_1, x_2) = f(-x_1, x_2) = f(x_1, -x_2) \rightarrow f^{SS}(x_1, x_2);$$

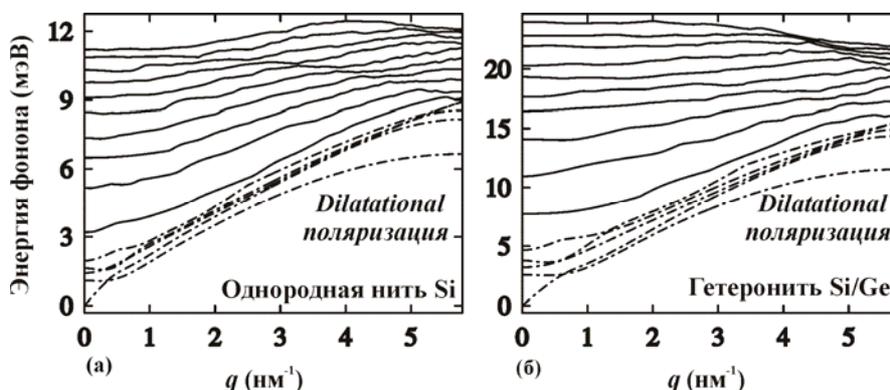
$$f(x_1, x_2) = -f(-x_1, x_2) = -f(x_1, -x_2) \rightarrow f^{AA}(x_1, x_2) \text{ и т.д.}$$

### Результаты и обсуждение

Для отыскания энергетических спектров акустических фононов решалась система уравнений (1). Были получены дисперсионные соотношения для всех четырех поляризаций. Расчёт проводился для прямоугольной гетеронити с внутренней прямоугольной частью из кремния, имеющей поперечное сечение 5 нм x 5 нм, в германиевой оболочке, притом что полное поперечное сечение нити бралось равным 8 нм x 8 нм. Для исследования влияния оболочки наряду с гетеронитью рассматривалась также прямоугольная нить без оболочки с поперечным сечением, равным сечению внутренней нити (5 нм x 5 нм). Ввиду большого числа поляризаций в квантовых нитях мы будем приводить и обсуждать данные для dilatational поляризации. Полное число фононных ветвей в квантовой нити равняется утроенному числу атомов в поперечном сечении нити. В случае нити размером 8 нм x 8 нм количество фононных ветвей равно 645.

На рис.2 приведены графики дисперсионных кривых dilatational поляризации для нитей: (1a) Si, 5 нм x 5 нм.; (1б) Si/Ge 8 нм x 8 нм, поперечное сечение Si нити – 5 нм x 5 нм. Из приведенных

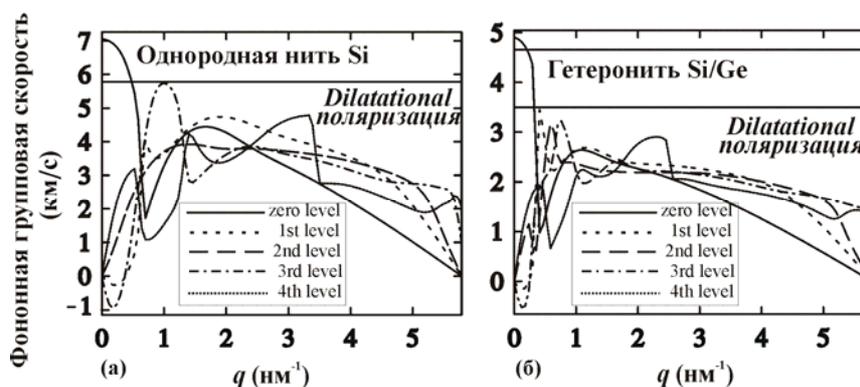
графиков видно, что при одинаковых  $q$  в гетеронити значения энергии фононов ниже, чем в однородной нити, благодаря оболочке из  $Ge$ , обладающего более низкими упругими свойствами. Сложный ход кривых дисперсии энергии отражается на виде кривых групповых фононных скоростей, описываемых формулой  $v_S(q) = \frac{d}{dq} \omega_S(q)$ .



**Рис.2.** Зависимость энергии акустических фононов от волнового числа  $q$  для dilatational поляризации в (а) однородной квантовой нити из Si размером 5 нм x 5 нм, (б) гетеронити Si/Ge размером 8 нм x 8 нм (поперечное сечение внутренней нити из Si – 5 нм x 5 нм). Изображены нижайшие 5 уровней энергии, а также ветви с квантовыми номерами  $s=10, 20, 30, \dots 100$ .

На рис.3 представлены зависимости групповых скоростей dilatational фононных мод от фононного волнового числа  $q$  в однородной нити из Si с поперечным сечением 5 нм x 5 нм и в гетеронити Si/Ge с геометрическими размерами 8 нм x 8 нм (поперечное сечение внутренней части Si – 5 нм x 5 нм).

Продольная (8,44 км/с) и поперечная (5,84 км/с) скорости звука в объемном Si и продольная (4,86 км/с) и поперечная (3,57 км/с) скорости в объемном Ge на приведенных графиках изображены сплошными горизонтальными линиями.



**Рис.3.** Дисперсии скорости акустических фононов для dilatational поляризации в (а) однородной квантовой нити из Si размером 5 нм x 5 нм, (б) гетеронити Si/Ge размером 8 нм x 8 нм (поперечное сечение внутренней нити из Si – 5 нм x 5 нм). Изображены скорости нижайших 5 акустических ветвей.

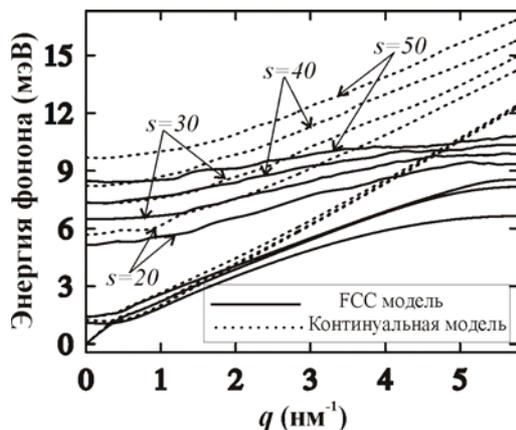
Из рисунков видно, что:

- 1) для случая однородной нити и гетеронити скорости всех мод при  $q = q_{\max}$  стремятся к нулю;
- 2) групповая скорость dilatational объемноподобной моды ( $s=0$ ) при  $q \rightarrow 0$  в однородной нити близка к продольной скорости в объемном Si;
- 3) групповая скорость для колебательной моды с  $s=0$  при малых  $q$  в гетеронити меньше, чем в однородной нити. Это объясняется влиянием внешней оболочки Ge, обладающего более низкими упругими свойствами по сравнению с Si;

4) в случае гетеронити значения групповых скоростей фононов не превосходят значений объёмной скорости в *Ge*, а для однородной нити скорости не превосходят объёмной скорости в *Si*, при том, что последняя гораздо выше

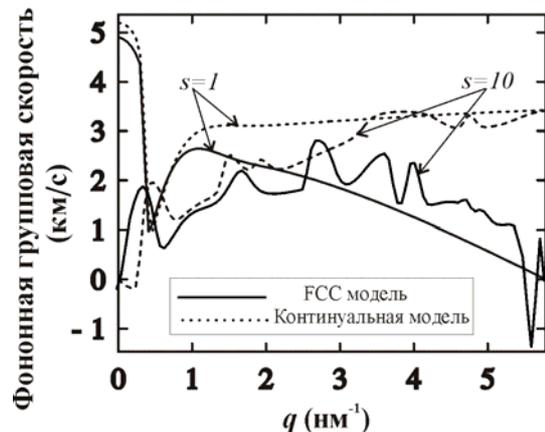
Для сравнения полученных результатов с результатами континуального приближения были численно решены уравнения движения (из [8]) для акустических фононов. На рис.4 приведены 3 нижайших фононных ветви, а также фононные ветви с квантовыми номерами  $s=20, 30, 40, 50$ .

Как видно из рисунков, континуальное приближение достаточно хорошо описывает нижайшие фононные ветви ( $s=1-3$ ) при относительно небольших  $q$  ( $q = 1,5 \text{ нм}^{-1}$ ). С ростом  $q$  появляется разница между энергиями, которая при максимальном значении волнового числа становится равной 4-6 мэВ. Энергии более высоких фононных ветвей ( $s=20-50$ ) отличаются для всех значений волнового числа, причем с ростом  $q$  и номера ветви  $s$  этот разрыв также увеличивается. Для ветви с  $s=50$  разница в энергиях составляет 7 мэВ для наибольшего  $q$ . Следует отметить, что при максимальной величине волнового числа кривые дисперсии в динамической модели становятся плоскими, в то время как в континуальном приближении вблизи  $q_{\text{max}}$  кривые имеют значительный наклон. Отличия групповых скоростей, полученных из динамической и континуальной теорий для некоторых дисперсионных кривых, показаны на рис. 5.



**Рис.4.** Дисперсии энергии для фононов dilatational поляризации в прямоугольной гетеронити Si/Ge размером 8 нм x 8 нм (поперечное сечение внутренней Si нити – 5 нм x 5 нм), рассчитанные в рамках динамической и континуальной моделей.

Показаны 3 нижайших моды, а также ветви с квантовыми номерами  $s=20, 30, 40, 50$ .



**Рис.5.** Групповые скорости для фононов dilatational поляризации в прямоугольной гетеронити Si/Ge размером 8 нм x 8 нм (поперечное сечение внутренней Si нити – 5 нм x 5 нм), рассчитанные в рамках динамической и континуальной моделей.

Как можно видеть из рис.5, для фононной ветви с квантовым номером  $s=0$  для малых  $q < 1 \text{ нм}^{-1}$  скорости, полученные в континуальном приближении, близки к скоростям, полученным в динамической FCC-модели. С возрастанием  $q$  отличие между скоростями увеличивается и становится наибольшим (3,5 км/с) при максимальном  $q$ . Для более высоких уровней энергии ( $s=10$ ) разность между скоростями возникает даже при малых  $q$  и достигает предельного значения, равного 3,5 км/с при  $q = q_{\text{max}}$ .

## Выводы

Развита FCC-динамическая модель колебаний решётки. Найдены энергетические спектры и групповые скорости фононов в гетеронитях из различных по акустическим свойствам материалов. Рассчитаны дисперсии энергии и скорости в такой модели для однородных нитей и гетеронитей. Изучено влияние оболочки с низкой упругостью на акустические свойства гетеронитей. Произведено сравнение полученных результатов с результатами континуального приближения. Показано, что

континуальный подход применим для нижайших фононных ветвей ( $s < 5$ ) и малых значений  $q$  ( $q < 1,5 \text{ нм}^{-1}$ ). Для больших  $s$  и  $q$  континуальное приближение дает завышенное по сравнению с FCC-динамической моделью значение энергии (на 7-10 мэВ) и скорости (3-4 км/с) акустических фононных мод.

Установленное с использованием FCC-динамической модели понижение энергии и групповых скоростей фононов в гетеронитях может иметь существенное значение при выборе нитей с низкой фононной теплопроводностью.

#### Литература:

1. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. – Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1962, с. 66-84.
2. Balandin A.A. Acoustic Phonon Confinement in Nanostructures and its Effect on the Thermal Lattice Conductivity. 11<sup>th</sup> International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter Physics, St. Petersburg, Russia, July, 2004, Book of Abstract, pp. 6-7.
3. Balandin A. and Wang K.L. // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58. – P. 1544.
4. Farvacque J.L. and Bouqrioua Z. // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68. – P.035335.
5. Bannov N., Aristov V., Mitin V. and Stroschio M.A. // *Phys. Rev. B.* – 1995. – Vol.51. – P. 9930.
6. Mingo N. and Liu Yang // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol.68. – P.245406-1.
7. Tubino R., Piseri L. and Zerbi G. // *J. Chem. Science.* – 1972. – Vol.56. – P.1022.
8. Nika D., Zencenco N. and Al-Sabayleh M. // *Mold. J. Phys. Sc.* – 2006. – Vol.V. – P.103.

*Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (грант 05-104-7656), а также проектов РМ 06.408.036F и 06.35.CRF.*

*Prezentat la 13.07.2007*