

## ФОНОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОДНОРОДНЫХ СЛОЁВ: СРАВНЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ FCC-МОДЕЛИ И КОНТИНУАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

*Надежда ЗИНЧЕНКО*

*Лаборатория физики многослойных структур и молекулярного магнетизма*

Este investigată conductibilitatea termică a rețelei în straturi cu dimensiuni nanometrice din Si și Ge în cadrul modelului dinamic-molecular FCC (face-centered cubic cell) și al abordării continue. A fost verificată aplicabilitatea abordării continue pentru calculele conductibilității termice în nanostructuri și a fost stabilit că abordarea continuă dă valori ale conductibilității termice de 2-4 ori mai înalte decât modelul FCC.

In the presented article we report on the investigation of phonon thermal conductivity in Si and Ge nanoslabs in the framework of molecular dynamic face-centered cubic cell (FCC) model and continuum approach (c.a.). We verified the applicability of c.a. for calculations of the thermal conductivity in nanostructures and found that c.a. strongly overstates (by the factors of 2 - 4) the thermal conductivity value in comparison with more accurate FCC model.

### 1. Введение

С уменьшением размеров современных приборов и с увеличением количества рассеиваемого ими тепла, проблема отвода теплоты и управления тепловыми свойствами становится особенно важной для дальнейшего прогресса электронной промышленности. Хорошо известно, что теплопроводность однородных полупроводниковых наноструктур значительно меньше теплопроводности составляющих их объёмных материалов [1-4]. В технологически важных полупроводниках и диэлектриках тепло в основном переносится акустическими фононами, и уменьшение теплопроводности происходит благодаря усилению рассеяния фононов на границе и, в очень маленьких структурах, благодаря перестройке спектра акустических фононов и уменьшению фононных групповых скоростей [2-4] (slab-effect). Уменьшение толщин нанослоев и площадей сечения нанонитей приближают фононные спектры этих объектов к их двумерным и одномерным пределам [4-6]. Таким образом, наноструктуры предлагают новый метод контроля фононного транспорта через соотношения дисперсии (фононная инженерия) [2,5,7-8].

Уменьшение теплопроводности, снижающее отвод тепла от современных микро- и наночипов, является нежелательным для низкоразмерных электронных приборов, однако, оно является благоприятным для термоэлектрических устройств, где требуются материалы с высокой электропроводностью и низкой теплопроводностью [7-8]. Ранее было показано, как теоретически, так и экспериментально, что уменьшение теплопроводности Si тонких пленок со свободными границами [2] и Si нанонитей [3,6,9] может составлять два порядка величины от объёмного значения.

Очень часто при теоретическом моделировании транспортных свойств наноструктур пользуются континуальным приближением, которое необоснованно для высокоэнергетических фононов с малой длиной волны. Однако, как показано в [10], поскольку высокоэнергетические фононы практически не участвуют в электрон-фононном взаимодействии, использование континуальных фононных мод при расчете подвижности электронов, лимитированной акустическими фононами, является достаточно обоснованным. Насколько нам известно, до сих пор в литературе не приводился точный количественный анализ применимости континуальных фононных мод для расчета теплопроводности наноструктур.

В данной работе мы исследуем решеточную теплопроводность однородных германиевых и кремниевых нанослоев, полученную с использованием континуального приближения [4] и FCC (face-centered cubic cell) динамической модели [11-12] для акустических фононов. Расчеты теплопроводности проводились с учетом всех основных механизмов фононного рассеяния [1-3], таких как рассеяние на точечных дефектах и примесях, рассеяние на границах и рассеяние в Umklapp процессах.

## 2. Теоретическая модель

Фононная теплопроводность представляет собой функционал фононных энергий, фононных групповых скоростей и полного фононного времени релаксации  $\tau_{tot}$ . Основываясь на результатах, полученных в [3,13], мы учитываем следующие механизмы фононного рассеяния в наноструктурах:

### 1. Umklapp процессы

$$\frac{1}{\tau_{Us}(q,s)} = 2\gamma^2 \frac{kT}{\rho V_0 v_s^2(q)} \frac{\omega_s^2(q)}{\omega_{\max}^s} \quad (1)$$

В формуле (1)  $q$  – волновое число,  $\gamma$  – параметр Грюнейзена,  $V_0$  – объём, приходящийся на 1 атом,  $(\omega_s)_{\max}$  – максимальная частота  $s$ -ой фононной ветви,  $\rho$  – плотность материала,  $v_s$  – групповая скорость  $s$ -ой фононной ветви. Остальные обозначения являются общепринятыми.

### 2. Рассеяние на точечных дефектах:

$$\frac{1}{\tau_{PDs}(s)} = \frac{S_0 \Gamma q_s(\omega_s)}{4 v_s(\omega_s)} \omega_s^2, \quad (2)$$

Параметр  $\Gamma$  [3] в формуле (2) характеризует интенсивность рассеяния на точечных дефектах,  $S_0 = S/G$  в смысле средней площади на один атом двумерной пленки, то есть  $S_0 = V_0/h$ , где  $h$  – высота элементарной ячейки вдоль оси  $Z$ .

### 3. Рассеяние на поверхностях:

$$\frac{1}{\tau_B} = \frac{v_s(q)}{d} \frac{1-p}{1+p}, \quad (3)$$

где  $d$  – толщина гетероструктуры.  $p$  – параметр, характеризующий силу поверхностного рассеяния (меняется от 0 до 1; значение  $p=1$  означает, что нет рассеяния на границах наноструктуры).

### 4. Рассеяние на дислокациях:

$$\frac{1}{\tau_{DC}} = \eta N_D \frac{(V_0)^{4/3} (\omega_s(q))^3}{(v_s(q))^2}, \quad (4)$$

где  $N_D$  – плотность дислокационных линий,  $\eta$  – весовой множитель, учитывающий взаимную ориентацию направлений градиента температуры и дислокационных линий.

Полное время релаксации вычислялось с помощью формулы:

$$1/\tau_{tot} = 1/\tau_U + 1/\tau_{pd} + 1/\tau_B + 1/\tau_{DC}. \quad (5)$$

Теплопроводность плоских наноструктур, полученная с учетом двумерной плотности фононных состояний, имеет вид [11]:

$$\kappa_{ph} = \frac{1}{4\pi k_B T^2 d} \sum_{\alpha,s} \int_0^{q_{\max}} (\hbar \omega_s^\alpha(q))^2 \left( \frac{\partial \omega_s^\alpha(q)}{\partial q} \right)^2 \tau_{tot}(\omega_s^\alpha) \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s^\alpha(q)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s^\alpha(q)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} q dq, \quad (6)$$

где суммирование ведётся по всем акустическим ветвям  $s$  всех поляризаций  $\alpha$ .

Энергии  $\hbar \omega_s^\alpha(q)$  и групповые скорости  $\frac{\partial \omega_s^\alpha(q)}{\partial q}$  акустических фононов, используемые в расчёте решёточной теплопроводности, были нами получены в рамках динамической FCC-модели, а также в континуальном приближении.

### 3. Результаты и их обсуждение

Расчёт фононной теплопроводности проводился для плоских однородных наноструктур из кремния и германия с толщинами 4,88 нм (19 атомных слоев). Для отыскания энергетических спектров акустических фононов в рамках динамической FCC-модели решалась система уравнений (1) из [14]. Для сравнения значений теплопроводности наряду с динамической моделью использовался также непрерывный подход для акустических фононов [4,15].

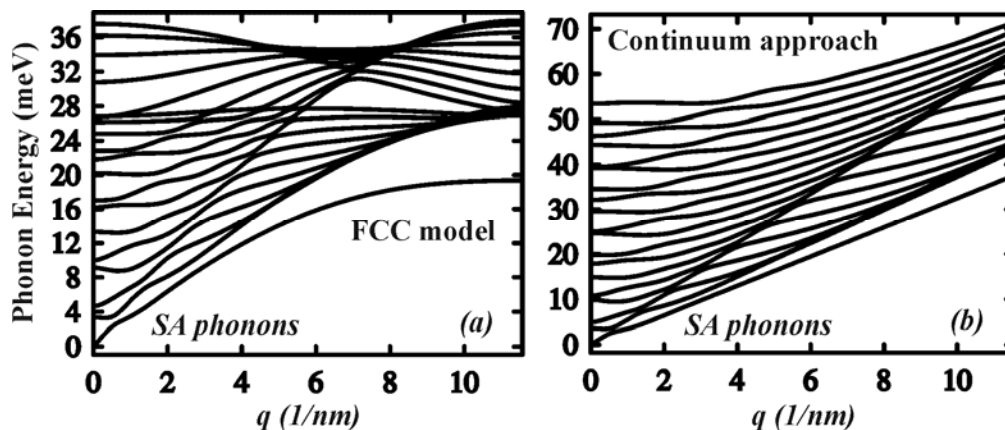


Рис.1. Спектры акустических фононов SA поляризации в слое кремния, полученные в динамической (панель (а)) и непрерывной (панель (б)) моделях.

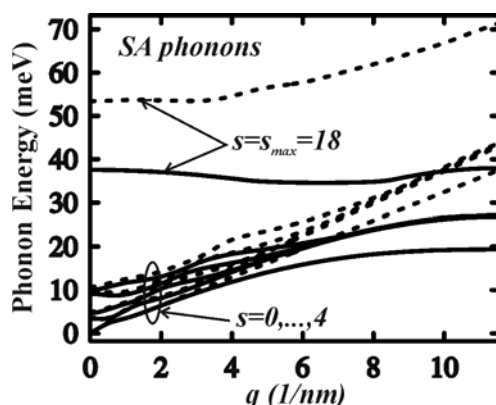


Рис.2. Зависимость энергии акустических фононов SA поляризация для пяти нижайших размерно-квантованных ветвей  $s=0, \dots, 4$  и самой высокой ветви  $s=18$ , рассчитанных в FCC (непрерывные линии) и непрерывной (линии из точек) моделях.

Как видно из рис. 1 и 2, непрерывное приближение достаточно хорошо описывает нижайшие фононные ветви при небольших  $q$  ( $q < 4 \text{ nm}^{-1}$ ). С ростом  $q$  возрастает разница в энергиях нижайших мод, которая при максимальном значении волнового числа становится равной 20 мэВ для мод с  $s=0, \dots, 4$ . Энергии более высоких фононных ветвей отличаются для всех значений волнового числа. Важно отметить, что при максимальной величине волнового числа кривые дисперсии в динамической модели становятся плоскими, в то время как в непрерывном приближении вблизи  $q_{\text{max}}$  кривые имеют значительный наклон.

Еще одним важным отличием динамических моделей и непрерывного приближения является количество нормальных фононных мод: в FCC-модели это количество ограничено и равно числу степеней свободы рассматриваемой наноструктуры; в непрерывном приближении количество мод неограничено и возникает необходимость «обрезать» спектр акустических фононов [4]. В настоящей работе мы естественным образом «обрезали» количество непрерывных фононных дисперсионных ветвей из условия равенства количества фононных мод в обеих моделях, поэтому было взято  $s_{\text{max}} = 18$  для непрерывного подхода.

Особенности дисперсий акустических фононов проявляются на зависимости фононных групповых скоростей от волнового числа, показанных на рис. 3 для FCC (рис. 3(a)) и континуальной (рис. 3(б)) моделей.

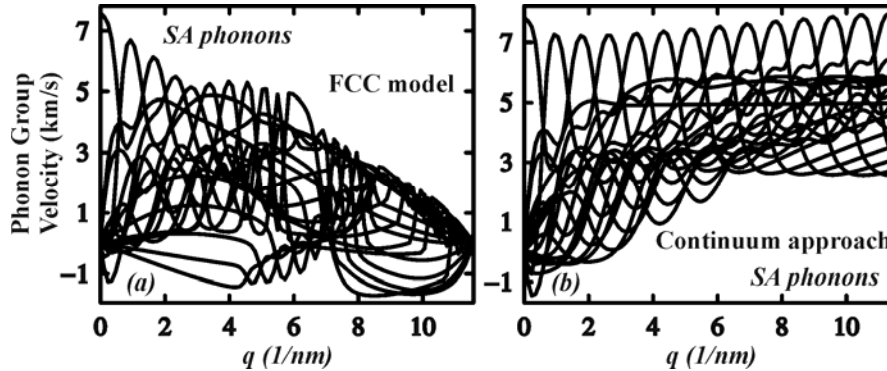


Рис. 3. Групповые скорости фононов в слое кремния в динамической (панель (а)) и континуальной (панель (б)) моделях.

Групповые скорости всех мод, полученных в FCC модели, стремятся к нулю при приближении  $q$  к  $q_{max}$ , в то время как скорости мод, рассчитанных в континуальной теории, стремятся к поперечной скорости звука  $v_t^{bulk}$  в объемном Si. Поэтому усредненная групповая скорость в случае FCC-мод будет убывать до 0 с ростом частоты фонона, а средняя скорость континуальных мод с ростом частоты будет стремиться к ненулевому значению  $v_t^{bulk}$ . Это различное поведение скоростей обуславливает огромную разницу в значениях решеточной теплопроводности, рассчитанной на основе континуальных и FCC акустических фононов. При расчете теплопроводности были использованы следующие материальные параметры:  $\Gamma = 0,83 \times 10^{-3}$  [3],  $\eta = 0,55$  [3],  $\gamma = 0,56$  [2] и  $p = 0,6$ .

На рис. 4 показана зависимость решеточной теплопроводности от температуры для кремниевых и германиевых слоев толщиной 4.88 нм. Непрерывные линии на графике соответствуют результатам молекулярно-динамической FCC-модели, а штриховые линии – континуальному приближению.

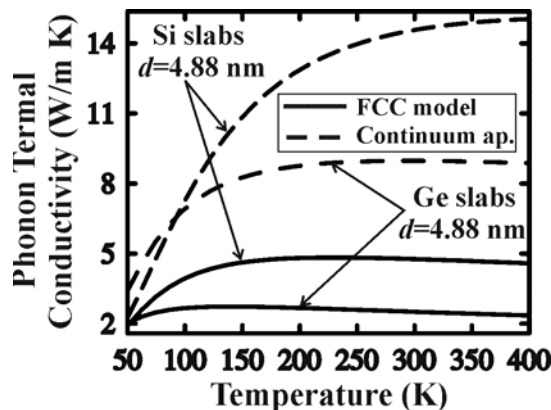


Рис.4. Зависимость фононной теплопроводности от температуры в кремниевых и германиевых слоях. Показаны результаты, полученные в рамках FCC-модели (непрерывные линии) и континуального подхода (штриховые линии).

Как видно из графика, континуальная модель сильно завышает значения решеточной теплопроводности, по сравнению с FCC-моделью. Это завышение объясняется неправильным ходом кривых дисперсии акустических фононов в континуальном приближении при больших  $q$ , которое приводит к высоким значениям скорости фононных мод вблизи границы зоны Брюллиена. Важно отметить, что с ростом температуры различие в отношениях теплопроводностей  $\kappa_{FCC} / \kappa_{Continuum}$  увеличивается: от 1,2 ( $T=50$  К)

до 3,3 ( $T=400$  K) для кремниевого слоя и от 1.7( $T=50$  K) до 3.8( $T=400$  K) для слоя из Ge, так как увеличивается разница в средних скоростях акустических фононов, полученных в разных моделях.

#### 4. Выводы

В работе исследованы температурные зависимости фоновой теплопроводности, рассчитанной в молекулярно-динамической FCC и континуальной моделях. Проведено количественное сравнение результатов этих двух моделей и установлено, что континуальный подход сильно завышает значение фоновой теплопроводности (в 2 – 4 раза для интервала температур 50 K – 400 K) из-за крутого хода кривых дисперсии высокоэнергетических акустических фононов. Таким образом, для правильного описания теплопроводности в наноструктурах принципиально важно использовать молекулярно-динамические модели акустических фононов.

#### Литература:

1. A.A. Balandin and J. Zou // Thermal Transport in Semiconductor Nanostructures in Quantum Dots and Nanowires, edited by S Bandyopadhyay (American Scientific Publishers, Los Angeles, USA). - 2003. - p.303.
2. A.A. Balandin and K.L. Wang // Phys. Rev. B - 1998. - Vol. 58. - p.1544.
3. J. Zou and A.A. Balandin // J. Appl. Phys. - 2002. - Vol. 89. - p.2932.
4. A.A. Balandin, E.P. Pokatilov and D.L. Nika // J. Nanoelectron. Optoelectron. - 2007. - Vol 2. - p.140.
5. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // Phys. Rev. B - 2005. - Vol. 72. - p.113311
6. N. Mingo // Phys. Rev. B - 2003. - Vol. 68. - p. 113308.
7. A.A. Balandin // Phys. Low-Dim. Structures - 2002. - Vol. 5-6. - p.73.
8. A.A. Balandin // J. Nanoscience Nanotech. - 2005. - Vol. 5. - p.1015.
9. D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang and A. Majumdar // Appl. Phys. Lett. - 2003. - Vol. 83. - p.2934.
10. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // J. Appl. Phys. - 2004. - Vol. 95. - p.5626.
11. N.D. Zinenco, D.L. Nika, E.P. Pokatilov and A.A. Balandin // Journal of Physics: Conference Series - 2007. - Vol. 92. - p.012086.
12. S. Tamura, Y. Tanaka // Phys. Rev. B - 1999. - Vol. 60. - p.2627.
13. P.G. Klemens // Journal of wide-gap materials - 2000. - Vol. 7. - p.332.
14. Д.Л. Ника, Е.П. Покатилов, А.А. Баландин // Analele Științifice ale Universității de Stat din Moldova. Seria „Științe fizico-matematice” - 2006. - p.82.
15. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // Superlatt. Microstruct. - 2003. - Vol. 33. - p.155.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Академии наук Молдовы (проекты 08.819.05.05F, 08.819.05.08F), а также совместного гранта АНМ 08.822.05.04F и MRDA-CRDF MYSSP-1407.*

*Prezentat la 16.02.2008*