

## ФОНОННЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВО-ТОЧЕЧНЫХ СВЕРХРЕШЁТОК Si/Ge

**Артур АСКЕРОВ**

*Лаборатория физики многослойных структур и молекулярного магнетизма*

În cadrul modelului molecular-dinamic Valence Force Field au fost cercetate proprietățile fononice ale suprafețelor formate din punctele cuantice Si/Ge. Se arată, că vitezele de grup medii ale fononilor în suprafețele sunt practic nule într-un diapazon larg al energiei fononilor  $\hbar\omega > 10$  meV. Rezultatele obținute permit a prognoza valori mici ale conductibilității termice de rețea a suprafețelor comparativ cu firele cuantice.

In the framework of the molecular-dynamic Valence Force Field model we report on the theoretical investigation of phonon properties in Si/Ge one-dimensionally ordered quantum dot superlattices. It has been established that the average phonon velocity in superlattices is close to zero in the wide range of phonon energies  $\hbar\omega > 10$  meV. The obtained results allow us to predict the extremely low value of the lattice thermal conductivity in supra-crystals in comparison with regular quantum wires.

В настоящее время большой интерес вызывают свойства квантово-точечных сверхрешёток в связи с их возможным применением в производстве фотогальванических солнечных элементов, фотодетекторов, термоэлектрических элементов и т.д. Ввиду с продолжающейся миниатюризации электронных устройств становится всё более важным улучшение точности моделей, используемых для описания происходящих в них процессов. Континуальные модели, в которых пренебрегается решёточной структурой кристаллической решётки, пригодны для описания явлений с участием только длинноволновых фононов. Более реалистичны решёточные модели, так как в них учитывается атомарное строение вещества. Одной из простых решёточных моделей является Face-Centered Cubic Cell (FCC) модель, в которой две взаимопроникающие алмазоподобные решётки Браве представлены одной решёткой. Такая модель хорошо описывает акустические колебания решётки, однако не включает оптические колебания. Более полно колебательные свойства решётки описывает VALENCE FORCE FIELD модель, использующая различные типы потенциалов взаимодействия между атомами. Используемая нами VALENCE FORCE FIELD модель построена на основе динамических уравнений, записанных в гармоническом приближении. Мы учитывали взаимодействия атома с ближайшими (1-я сфера) и более отдалёнными (2-я сфера) атомами. Использовались радиальные и угловые двух- и трёхчастичные взаимодействия. Для расчёта дисперсионных кривых мы использовали stretching, stretching-stretching, bending и stretching-bending межатомные взаимодействия.

**Stretching**-взаимодействие. Соседний атом движется вдоль прямой, соединяющей его с центральным атомом. На него действует квазиупругая сила.

**Stretching-stretching**-взаимодействие. Два соседних атома движутся вдоль прямых. Угол между этими прямыми не меняется.

**Bending**-взаимодействие. Расстояние от соседних атомов до центрального не меняется, но меняется угол между соединяющими их прямыми.

**Stretching-bending**-взаимодействие. Меняется как угол, образованный атомами, так и расстояние до одного из них.

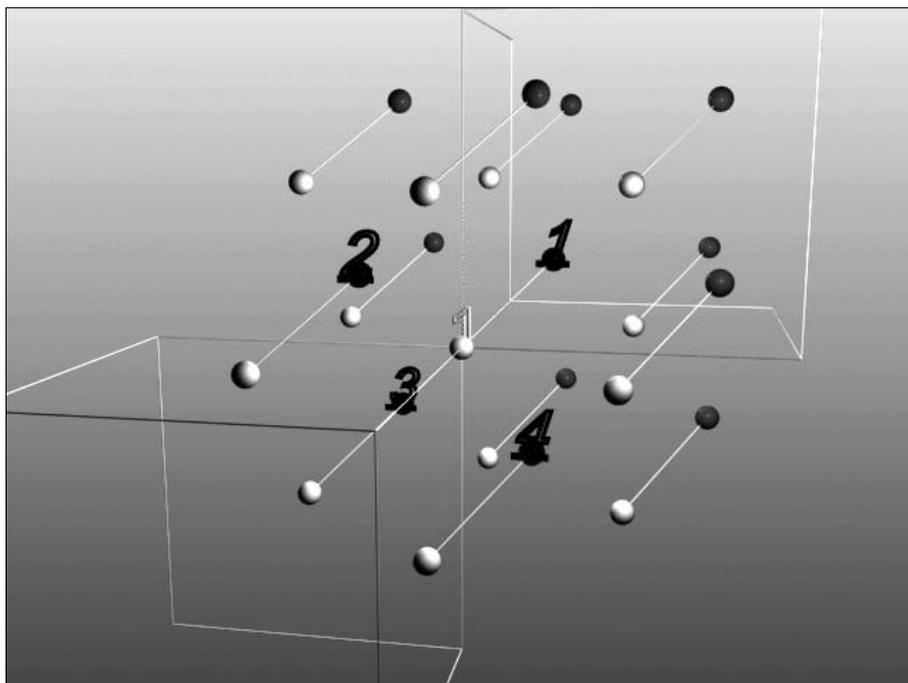
В наших расчётах использовались алмазоподобные кристаллические решётки кремния и германия – материалов, наиболее широко применяемых в современной электронике. Кристаллическая решётка кремния, как показано на рис.1, состоит из двух взаимопроникающих гранецентрированных подрешёток, сдвинутых одна относительно другой на  $\frac{1}{4}$  длины диагонали в направлении этой диагонали. Таким образом, образуются две подсистемы гранецентрированных решёток. На рисунке атомы одной подрешётки – белого цвета, атомы другой подрешётки – чёрного цвета. Стержни соединяют соответствующие атомы подрешёток.

В наших расчётах учитывалось взаимодействие атома со своими ближайшими соседями из первой сферы и более отдалёнными из второй сферы.

Атомы, составляющие первую сферу, находятся на наименьшем расстоянии от центрального атома. Центральный атом белого цвета, в начале координат с цифрой «1». Окружающие его атомы 1-ой сферы чёрного цвета, с цифрами «1», «2», «3», «4», то есть они принадлежат другой подрешётке Браве.

Атомы, составляющие вторую сферу, это наиболее близкие атомы, из не вошедших в первую сферу. На рисунке они изображены белым цветом и являются атомами той же подрешётки, что и центральный атом, относительно которого эти сферы рассматриваются.

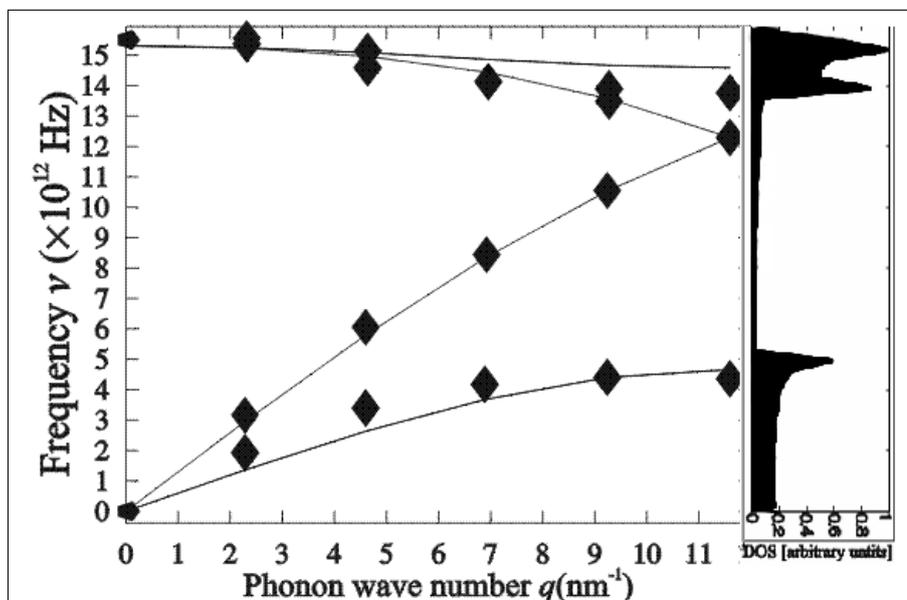
Аналогичным образом определяются сферы и у атома другой подрешётки, у чёрного атома «1».



**Рис.1.** Алмазоподобная кристаллическая решётка.

Атомы одной подрешётки – белого цвета, атомы другой подрешётки – чёрного цвета.

Расчёты проводились для гетероструктур и сверхрешёток из Si и Ge. Силовые константы играли роль подгоночных параметров и находились из сравнения рассчитанных и экспериментальных фоновых кривых дисперсий для объёмного Si и Ge. На рис.2 мы сравниваем результаты расчёта дисперсионных кривых в объёмном кремнии (сплошные линии) с данными эксперимента (чёрные ромбы). Как видно, VFF модель позволяет получить как акустические ветви колебаний, начинающиеся с нуля, так и оптические ветви, не равные 0 при  $q=0$ . Есть острые пики у DOS.



**Рис.2.** Сравнение результатов расчёта дисперсионных кривых в объёмном кремнии (сплошные линии) с данными эксперимента (чёрные ромбы). Справа показана DOS в произвольных единицах.

На основе дисперсионных кривых, полученных для объёмного случая, мы построили графики групповых скоростей. На рис.3 изображены групповые скорости для объёмного кремния. Видны оптические ветви, выходящие из нуля, и акустические ветви, имеющие ненулевое значение при  $q=0$ .

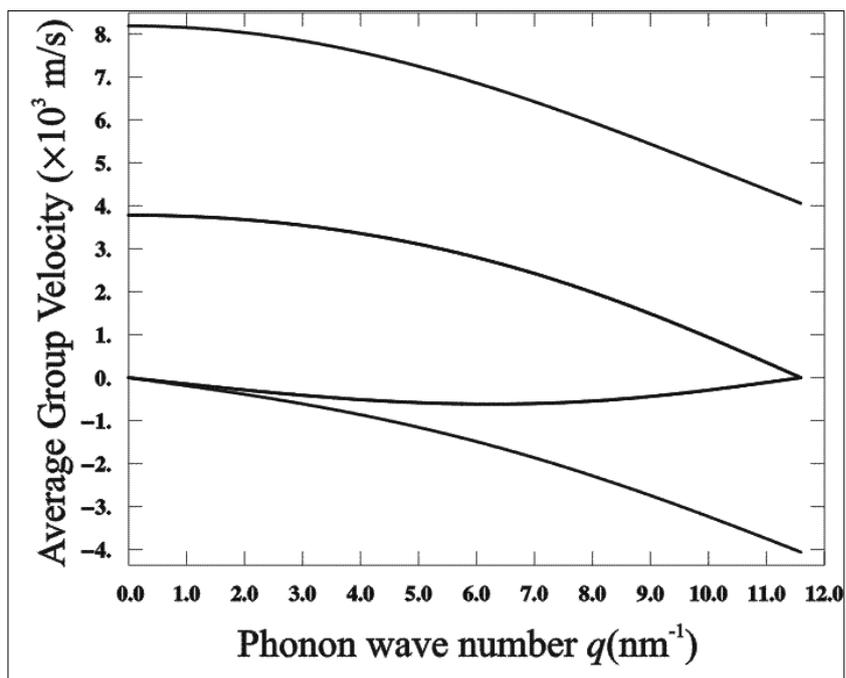


Рис.3. Средние групповые скорости для объёмного кремния.

Результаты расчёта дисперсионных кривых для пластины кремния, состоящей 18 атомных плоскостей, показаны на рис.4. Видно сильное расщепление дисперсионных кривых по сравнению с объёмным случаем. Это связано с пространственным конфайнментом фононов вдоль оси z. Нижний пучок – акустические моды, верхний – оптические моды, в середине – акустико-оптические моды.

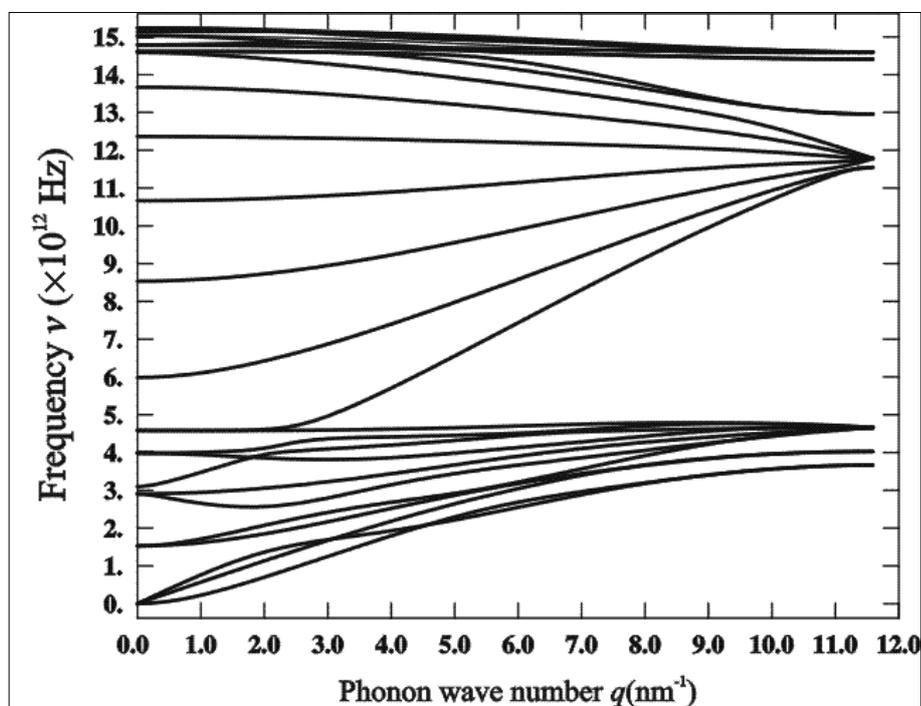


Рис.4. Дисперсионные кривые, полученные для 18-слойной пластины Si.

На графиках групповых скоростей, рис.5, полученных для пластины кремния, состоящей из 18 атомных плоскостей, видны оптические ветви, выходящие из нуля, и акустические ветви, имеющие ненулевое значение при  $q=0$ . Скорости меньше, чем в объёмном случае, за счёт размерного квантования.

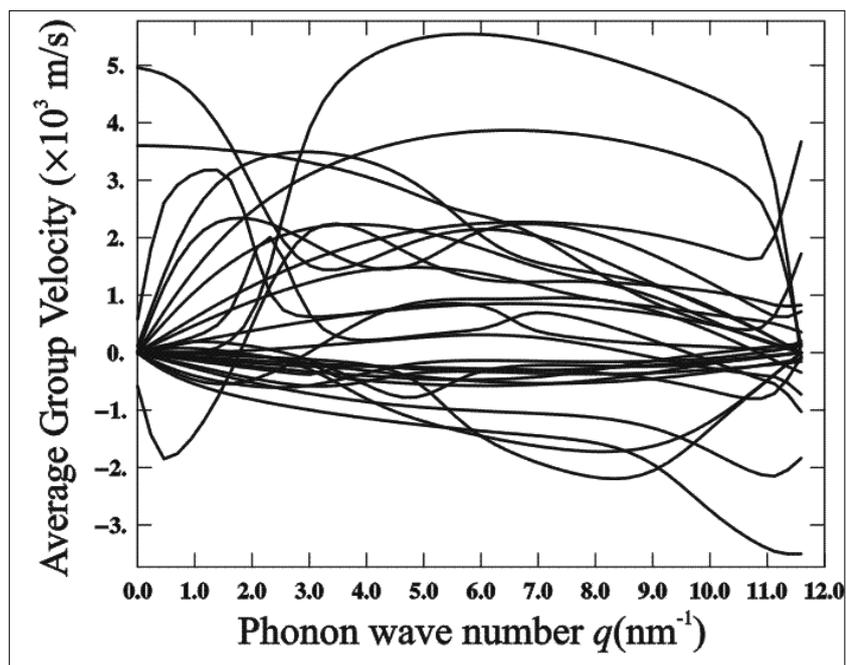


Рис.5. Средние групповые скорости для пластины кремния, состоящей из 18 атомных плоскостей.

Дисперсионные кривые для плоских гетероструктур Si-Ge-Si и Ge-Si-Ge изображены на рис.6 и рис.7. На рис.6 у DOS видны максимумы за счёт кремния сверху и за счёт оптических мод германия по середине. По сравнению с объёмом, DOS более равномерна.

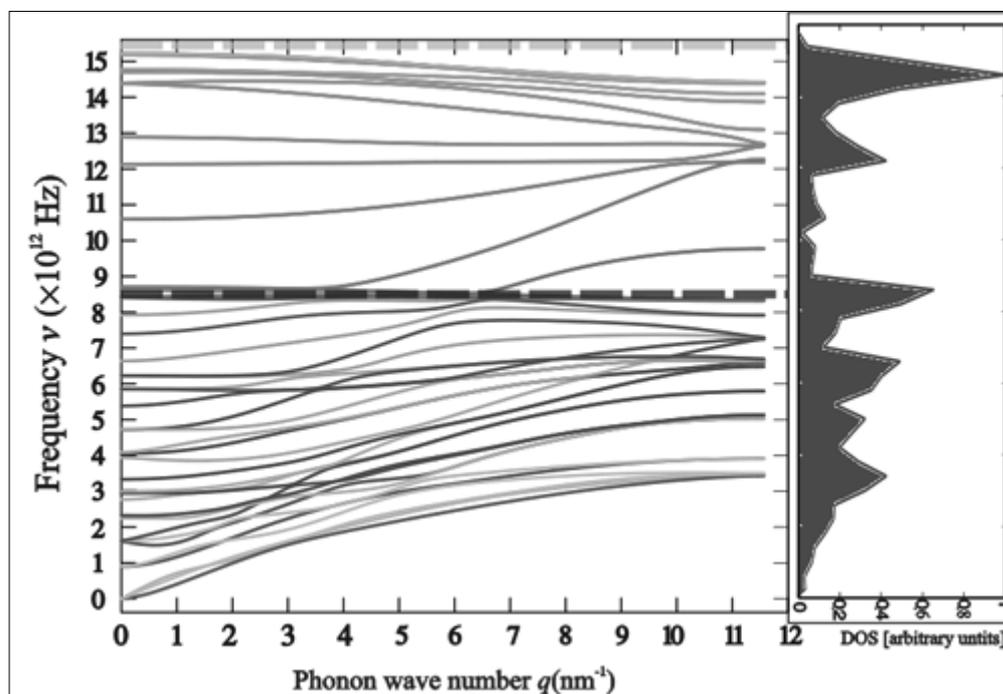


Рис.6. Дисперсионные кривые, полученные для плоской гетероструктуры Si-Ge-Si. Si – 2x6 атомных плоскостей. Ge – 6 атомных плоскостей. Справа показана DOS в произвольных единицах.

На рис.7 у DOS видны максимумы посередине за счёт оптических мод германия.

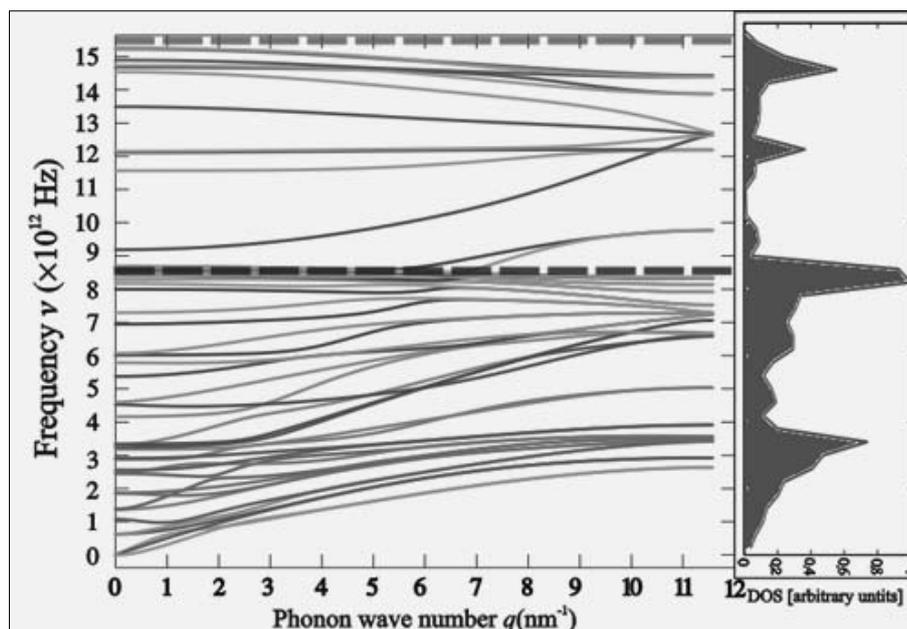


Рис.7. Дисперсионные кривые, полученные для плоской гетероструктуры Ge-Si-Ge. Si – 6 атомных плоскостей. Ge – 2х6 атомных плоскостей. Справа показана DOS в произвольных единицах.

Мы провели расчёт дисперсионных кривых для трёхмерной квантово-точечной сверхрешётки, изображённой на рис.8. Трансляционный элемент бесконечно копируется по всем трём направлениям осей координат. Тёмные области – из Ge, а полупрозрачные области – из Si.

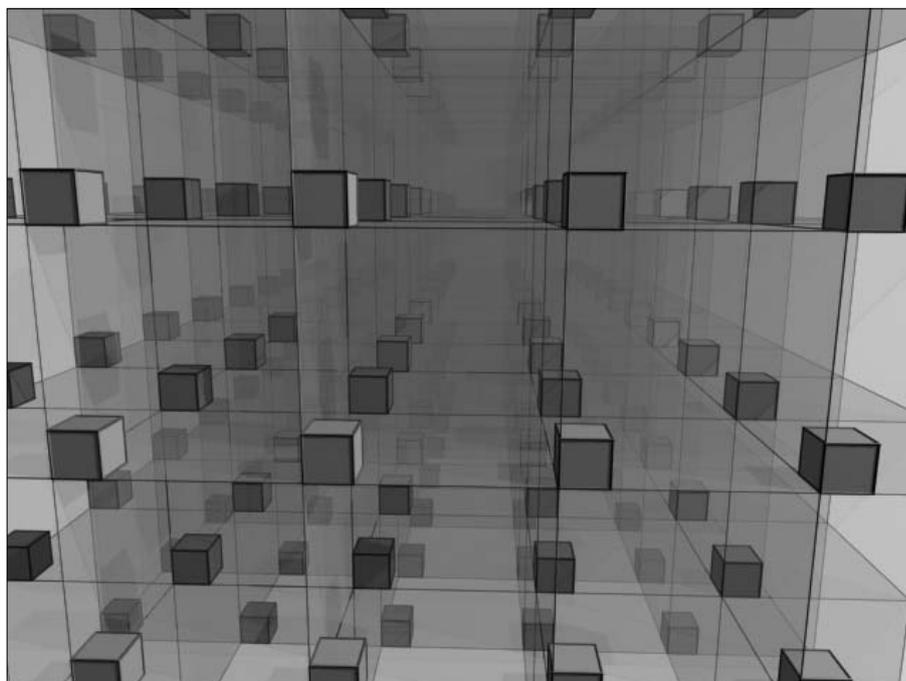


Рис.8. Схематический вид трёхмерной квантово-точечной сверхрешётки. Внутренние области, размером 0.813 нм, из атомов Ge (тёмного цвета); внешние области, размером 1.084 нм, из атомов Si (полупрозрачные).

Дисперсионные кривые, полученные в рамках VFF-модели, для сверхрешётки Si/Ge изображены на рис.9. Кристаллографическое направление [ 1, 1, 1]. На графиках DOS видны щели, но DOS более равномерно распределена по энергиям, чем в объёме и слоях.

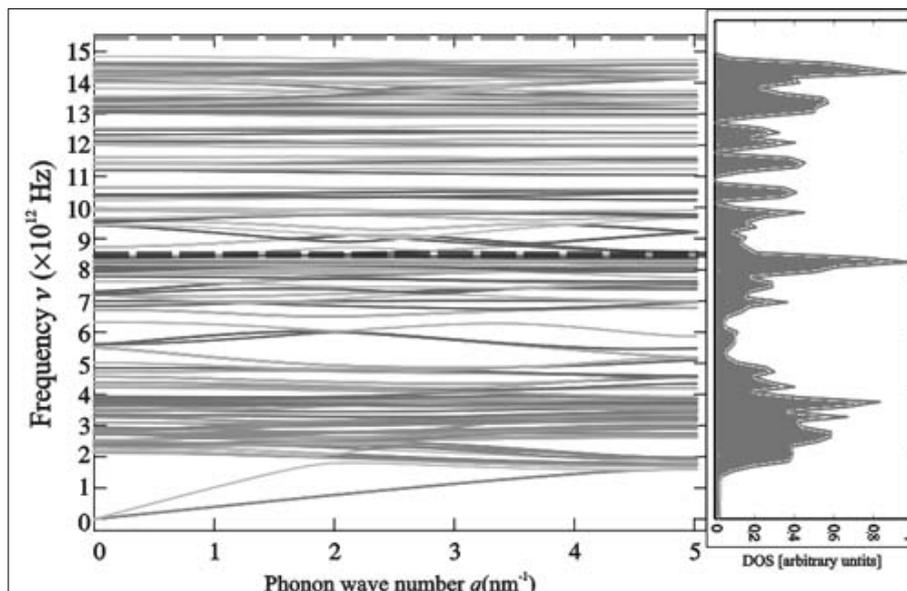


Рис.9. Дисперсионные кривые, полученные в рамках VFF-модели, для сверхрешётки Si/Ge. Справа показана DOS в произвольных единицах.

На рис.10 изображены групповые скорости, полученные в рамках VFF-модели, для сверхрешётки Si/Ge. Кристаллографическое направление  $[1, 1, 1]$ . Скорости меньше, чем в объёме и слоях.

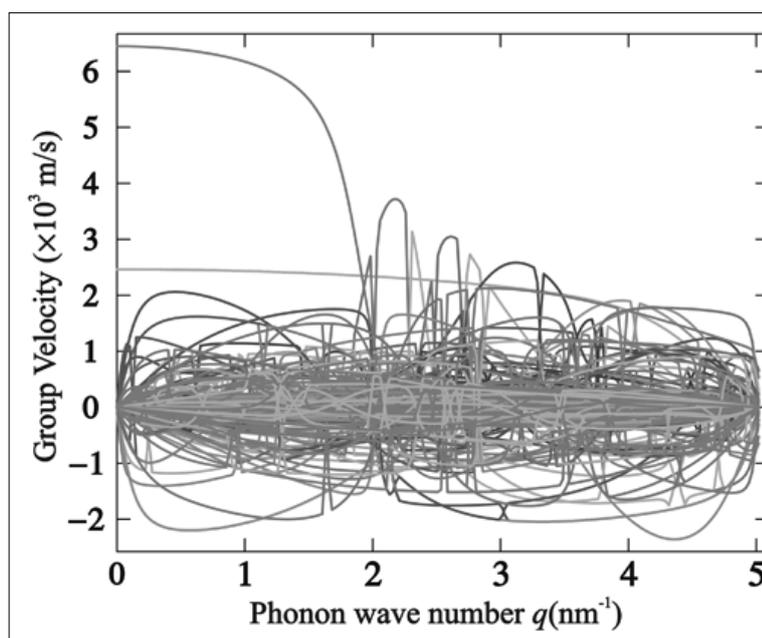


Рис.10. Средние групповые скорости, полученные в рамках VFF-модели, для сверхрешётки Si/Ge.

Мы установили, что в сверхрешётках возникает сильное расщепление дисперсионных кривых, вызванное пространственным конфайнментом фононов, и уплощение кривых дисперсии фононов, что ведет к уменьшению фоновых скоростей звука. В зависимости от конфигурации сверхрешетки и типа колебательных мод, колебания происходят либо по всей сверхрешетке, либо сосредотачиваются в одном из составляющих ее материалов.

Мы полагаем, что термоэлектрическая добротность в сверхрешётках будет выше, чем в объёме и плоских гетероструктурах.

*Выражаю благодарность за обсуждение и полезные советы профессору Покотилову Е.П. и доктору физ.-матем. наук Нике Д.Л.*

*Prezentat la 30.09.2009*