

## ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ПЛОСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Артур АСКЕРОВ

Молдавский государственный университет

Теоретически исследованы фоновые и тепловые свойства плоских гетероструктур на основе кремния и германия с помощью «Valence Force Field» модели и проведены расчёты теплопроводностей и тепловых потоков в этих гетероструктурах. Показано, что происходит сильное расщепление фононного спектра, вызванное пространственным конфинментом фононных мод. В зависимости от конфигурации гетероструктуры, колебания происходят либо по всей ширине гетероструктуры, либо сосредотачиваются в обкладках или во внутреннем слое. В Si/Ge/Si гетероструктурах наблюдается существенное падение теплопроводности по сравнению с однородными пластинами кремния и германия за счет сильной гибридизации фононных мод из разных слоев.

**Ключевые слова:** гетероструктура, теплопроводность, VFF, фонон.

### CONDUCTIVITATEA TERMICĂ A HETEROSTRUCTURILOR SEMICONDUCTOARE PLANE

În lucrare au fost cercetate, teoretic, proprietățile fononice și termice ale heterostructurilor plane pe bază de siliciu și germaniu utilizând modelul „Valence Force Field” și au fost făcute calcule ale conductivității termice și ale fluxului de căldură în aceste heterostructuri. S-a arătat că are loc o mare divizare a spectrului fononilor, ca urmare a izolării spațiale din modurile fononice. În funcție de configurația heterostructurii, fluctuațiile au loc fie pe toată lățimea heterostructurilor, fie se concentrează în plăcile sau în stratul interior. În heterostructurile Si/Ge/Si se observă o scădere semnificativă a conductivității termice în comparație cu plăcile omogene de siliciu și germaniu din cauza hibridizării puternice a modurilor fononice în straturi diferite.

**Cuvinte-cheie:** heterostructură, conductivitate termică, VFF, fonon.

### THERMAL CONDUCTIVITY OF PLANAR SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURES

In this paper there had been investigated theoretically the phonon and thermal properties of heterostructures based on planar silicon and germanium using «Valence Force Field» model and were performed calculations of thermal conductivity and heat flows in these heterostructures. It is shown that there is a strong splitting of the phonon spectrum, caused by spatial confinement of phonon modes. Depending on the configuration of the heterostructure, the oscillations are either over the whole depth or focus in the cladding layers or in the inner layer. In the Si / Ge / Si heterostructures there is a significant drop in thermal conductivity compared with homogeneous plates of silicon and germanium due to the strong hybridization of the phonon modes in different layers.

**Keywords:** heterostructure, thermal conductivity, VFF, phonon.

При создании современных электронных устройств одной из важнейших задач является управление тепловыми свойствами. Это связано прежде всего с тем, что современные полупроводниковые микросхемы обладают высокими рабочими частотами и высокой плотностью размещения элементов. В данном случае необходимы материалы с высокой теплопроводностью для эффективного отвода тепла. В то же время для создания термоэлектрических устройств с высоким КПД необходимы материалы с низкой теплопроводностью и хорошей электрической проводимостью.

Для расчёта теплопроводности в плоских гетероструктурах были использованы дисперсионные спектры, полученные в рамках FCC- (Face-Centered Cubic) [5] и VFF- (Valence Force Field) моделей [4]. В отличие от континуальных моделей, пренебрегающих атомарным строением вещества, эти две модели являются решёточными, то есть учитывают дискретность кристаллической решётки [3]. FCC-модель, в которой две взаимопроникающие алмазоподобные решётки Браве представлены одной гранцентрированной решёткой, хорошо описывает акустические колебания решётки, однако не включает оптические колебания. Более полно описывает колебательные свойства решётки VFF-модель, использующая различные типы потенциалов взаимодействия между атомами [1-2]. 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.

Расчёты проводились для гетероструктур из Si и Ge. Силовые константы играли роль подгоночных параметров для лучшего воспроизведения экспериментальных объёмных дисперсионных кривых [4].

Полученные дисперсионные спектры были использованы для расчёта теплопроводности в плоских гетероструктурах [5-6]. При расчёте времени рассеяния фононов принимались во внимание два механизма рассеяния: фонон-фононное рассеяние (Umklapp-рассеяние) и поверхностное рассеяние, причиной которого являются несовершенства поверхностей плоских структур [7-8]. Umklapp-рассеяние очень слабо проявляется при малых значениях энергии фононов, которым соответствуют малые значения модуля волнового вектора. Если принимать во внимание только Umklapp-рассеяние, то это, в свою очередь, приводит к чрезмерно завышенным значениям теплопроводности. Для более реалистичного расчёта необходимо принимать во внимание наличие других механизмов рассеяния фононов при малых  $q$ . Для этого в расчётах учитывается поверхностное рассеяние, что позволяет избежать искусственное ограничение пределов интегрирования. Umklapp-рассеяние будет возрастать как квадратичная функция от энергии фононов и модуля волнового вектора  $q$ . Поэтому при малых  $q$  поверхностное рассеяние будет играть доминирующую роль, а при больших  $q$ , которым соответствуют большие значения энергии фононов, доминирующая роль будет принадлежать Umklapp-рассеянию. Таким образом, время рассеяния  $\tau(\omega_s(q))$  будет ограниченной функцией с одним максимумом на всей области определения от 0 до  $q_{\max}$  [9].

### Основные формулы

Тепловой поток в плоской структуре может быть вычислен согласно следующему выражению:

$$\vec{J} = \sum_{s, \vec{q}} N_s(q) \cdot \vec{v}_s(q) \cdot \hbar \omega_s(q), \quad (1)$$

где  $s$  – номер фононной ветви,  $\vec{v}_s(q) \cdot \hbar \omega_s(q)$  – поток энергии, переносимой одним фононом,

$\vec{v}_s(q) = \frac{\partial \omega_s(q)}{\partial q}$  – групповая скорость фонона,  $N_s(q)$  – количество фононов в потоке.

Переходя в (1) от суммы к интегрированию по  $\vec{q}$ , получим:

$$k_{ph} = \frac{1}{4\pi d k_B T^2} \sum_s \left[ \int_0^{q_{\max}} (\hbar \omega_s(q))^2 \cdot \left( \frac{\partial \omega_s(q)}{\partial q} \right)^2 \cdot \tau(\omega_s(q)) \cdot \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} q dq \right]. \quad (2)$$

Тепловой поток через пластину равен

$$W_{ph} = k_{ph} \cdot d. \quad (3)$$

Отсюда, учитывая (2),

$$W_{ph} = \frac{1}{4\pi k_B T^2} \sum_s \left[ \int_0^{q_{\max}} (\hbar \omega_s(q))^2 \cdot \left( \frac{\partial \omega_s(q)}{\partial q} \right)^2 \cdot \tau(\omega_s(q)) \cdot \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q)}{k_B T}\right) - 1\right)^2} q dq \right]. \quad (4)$$

Обратное время Umklapp-рассеяния вычисляется по формуле

$$\frac{1}{\tau_U} = 2\gamma^2 \frac{k_B T}{M \langle v \rangle^2} \frac{(\omega_s(q))^2}{\omega_{\max}}, \quad (5)$$

где  $\gamma$  – параметр Грюнайзена,  $M$  – масса атома,  $\langle v \rangle$  – средняя скорость звука,  $\omega_{\max}$  – максимальное значение круговой частоты, в объёмном случае  $\omega_{\max}$  практически равна частоте Дебая  $\omega_D = q_D \cdot c_{sound}$  ( $q_D$  – радиус зоны Брюллиена,  $v_{sound}$  – скорость звука в объёме).

Обратное время поверхностного рассеяния вычисляется по формуле

$$\frac{1}{\tau_B} = \frac{v_s(q)}{d} \frac{1-p}{1+p}, \quad (6)$$

где  $p$  – параметр, характеризующий гладкость поверхности в процессах рассеяния на ней фононов. Параметр  $p$  изменяется от 0 до 1. Чем выше значение  $p$ , тем более гладкой является поверхность для рассеяния фононов.

Общее обратное время рассеяния  $\frac{1}{\tau}$  рассчитывается, согласно правилу Маттиссена, по формуле

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_B}. \quad (7)$$

### Результаты

На рис.1 показана зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины  $d$  для разных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$  при комнатной температуре. С ростом толщины пластины теплопроводность возрастает. Теплопроводность увеличивается также по мере увеличения параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Это связано с тем, что более высоким значениям  $p$  соответствует меньшее поверхностное рассеяние фононов и как следствие – увеличение средней длины пробега фононов и теплопроводности пластины.

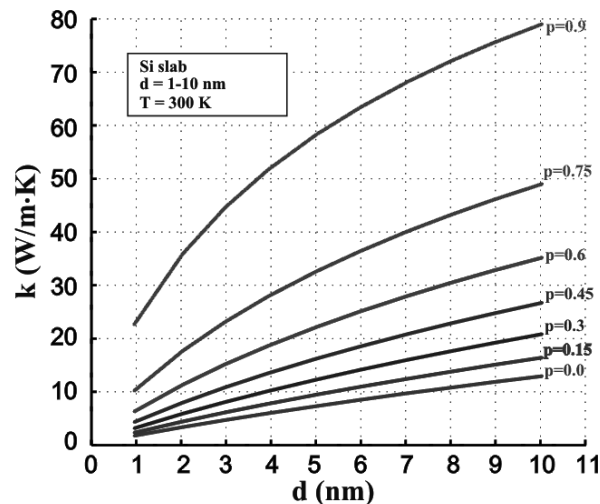


Рис.1. Зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины для разных значений параметра поверхностного рассеяния фононов  $p$ .

На рис.2 изображена зависимость теплопроводности пластины из кремния от её толщины для разных значений абсолютной температуры. Параметр поверхностного рассеяния фононов  $p$  равен 0,8. Здесь также с ростом толщины пластины возрастает теплопроводность. Однако с ростом температуры теплопроводность ведёт себя немонотонно: с повышением абсолютной температуры теплопроводность увеличивается, а затем, после 200К, начинает снижаться. Это объясняется усилением трехфононных процессов рассеяния.

На рис.3 изображена зависимость теплопроводности от температуры для различных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Сплошные линии соответствуют расчёту на базе дисперсий, полученных в FCC-модели; штриховые линии соответствуют расчёту на базе дисперсий, полученных в VFF-модели. Как видно, значение теплопроводности, рассчитанное на базе VFF-модели, превышает теплопроводность, подсчитанную на базе FCC-модели. Это объясняется различием спектров фононов, полученных в FCC- и VFF-моделях. Отношение теплопроводностей при температуре  $T = 300K$  возрастает с увеличением параметра  $p$ : от  $\frac{k_{phVFF}}{k_{phFCC}} = 1,71$  для  $p = 0,0$  до  $\frac{k_{phVFF}}{k_{phFCC}} = 1,85$  для  $p = 0,5$  и

$\frac{k_{ph VFF}}{k_{ph FCC}} = 2,33$  для  $p = 0,9$ . Отношение теплопроводностей при значении  $p = 0,9$  возрастает с увеличением абсолютной температуры: от  $\frac{k_{ph VFF}}{k_{ph FCC}} = 1,6$  для  $T = 100K$  до  $\frac{k_{ph VFF}}{k_{ph FCC}} = 2,33$  для  $T = 300K$ .

Рост различия между теплопроводностью, рассчитанной в FCC-модели, и теплопроводностью, рассчитанной в VFF-модели, объясняется заселением высокочастотных фононных мод, энергия которых в VFF-модели сильно отличается от энергии этих мод в FCC-модели.

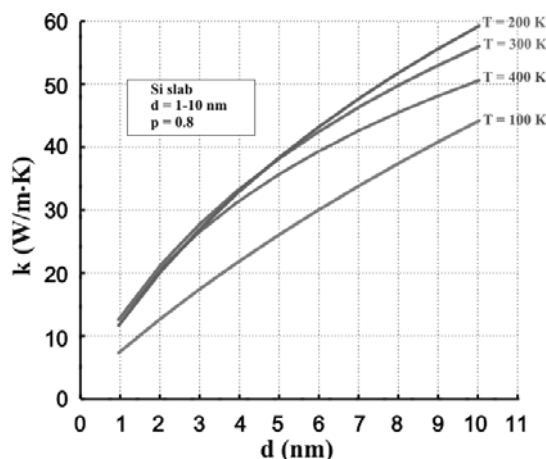


Рис.2. Зависимость теплопроводности кремниевого слоя от его толщины для разных значений абсолютной температуры.

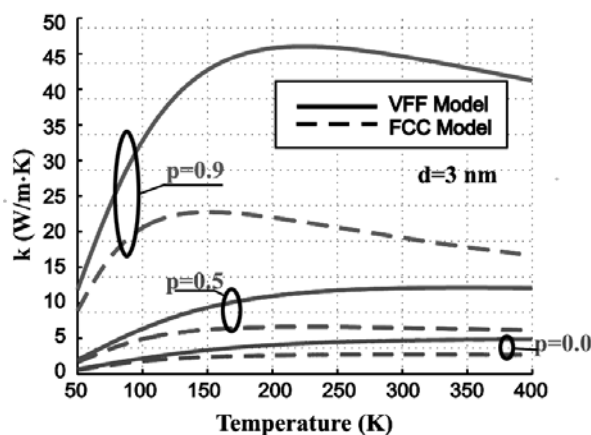


Рис.3. Зависимость теплопроводности от абсолютной температуры для различных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Штриховыми линиями показаны результаты для FCC-модели, сплошными линиями – для VFF-модели.

На рис.4 и рис.5 показаны зависимости теплопроводности и теплового потока от абсолютной температуры в плоских слоях германия толщиной 3 нм и 9 нм и гетероструктуре на основе германия (Si\Ge\Si) толщиной 9 нм. Расчёты проводились для двух значений параметра поверхностного рассеяния  $p = 0$  и  $p = 0,9$ . Толщина внутреннего слоя германия в гетероструктуре и толщины кремниевых обкладок равны 3 нм. Теплопроводность гетероструктуры меньше теплопроводности пластины из германия с такой же толщиной 9 нм. А при температурах ниже 100К, даже ниже, чем теплопроводность пластины германия толщиной 3 нм. Тепловой поток для гетероструктуры Si\Ge\Si примерно в 1,5 - 2,0 раза меньше, чем для пластины Ge такой же толщины, вне зависимости от значения параметра поверхностного рассеяния  $p$ . С увеличением температуры разница между этими тепловыми потоками уменьшается из-за заселения высокоэнергетических высокоскоростных кремнийподобных фононных мод.

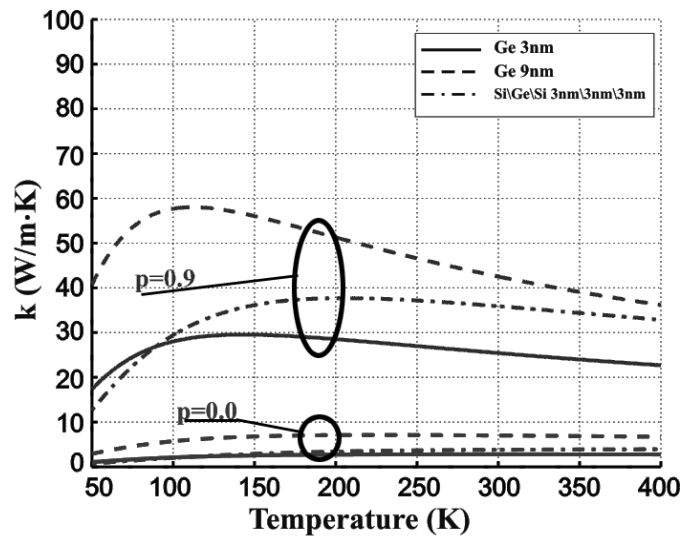


Рис.4. Зависимость теплопроводности от абсолютной температуры для разных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Гетероструктуры на основе германия.

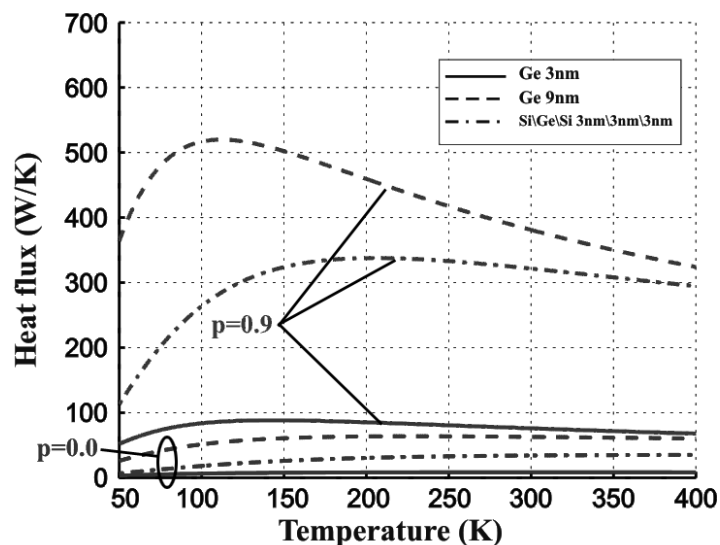


Рис.5. Зависимость теплового потока от абсолютной температуры для разных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Гетероструктуры на основе германия.

На рис.6 и рис.7 изображены зависимости теплопроводности и теплового потока от абсолютной температуры в плоских слоях кремния толщиной 3 нм и 9 нм и гетероструктуре на основе кремния ( $\text{Ge}\backslash\text{Si}\backslash\text{Ge}$ ) толщиной 9 нм. Расчёты проводились для двух значений параметра поверхностного рассеяния  $p = 0$  и  $p = 0,9$ . Толщина внутреннего слоя кремния в гетероструктуре и толщины германиевых обкладок равны 3 нм. Теплопроводность гетероструктуры толщиной 9 нм меньше теплопроводности пластин кремния толщиной 9 нм и 3 нм. При  $p = 0,9$  тепловой поток через гетероструктуру в 2-3 раза меньше, чем через пластину кремния такой же толщины. Ещё большее различие при  $p = 0$ . Тепловые потоки в гетероструктурах на основе кремния и германия меньше, чем тепловые потоки в однородных пластинах из кремния и германия такой же толщины. Это связано с модификацией фононного спектра гетероструктур, ведущего к уменьшению групповой скорости фононов. Модификации фононного спектра в гетероструктуре могут приводить к появлению трёх видов фононных мод:

- а) внутренних фононных мод, сосредоточенных во внутреннем канале гетероструктуры;
- б) внешних фононных мод, сосредоточенных в обкладках гетероструктуры;
- в) смешанных фононных мод, равномерно распределённых как во внутреннем канале, так и во внешних обкладках гетероструктуры.

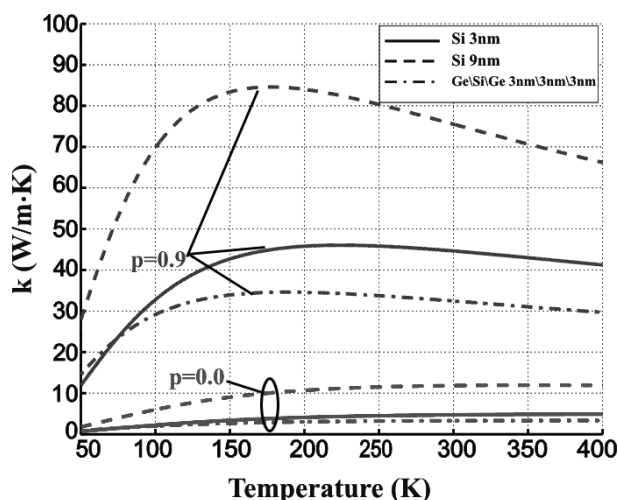


Рис.6. Зависимость теплопроводности от абсолютной температуры для разных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Гетероструктуры на основе кремния.

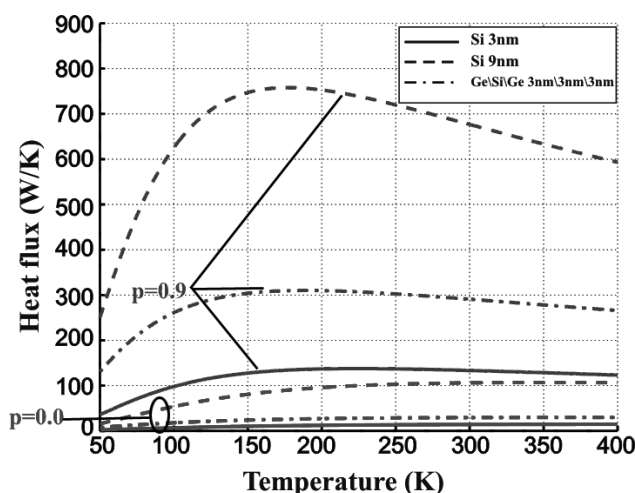


Рис.7. Зависимость теплового потока от абсолютной температуры для разных значений параметра поверхностного рассеяния  $p$ . Гетероструктуры на основе кремния.

### Выводы

В результате проведенных расчётов было установлено, что в плоских гетероструктурах и однородных пластинах наблюдается сильное расщепление фононного спектра, вызванное пространственным конфинментом фононных мод. В зависимости от конфигурации гетероструктуры, колебания происходят либо по всей толще, либо сосредотачиваются в обкладках или во внутреннем слое. В Si/Ge/Si гетероструктурах наблюдается существенное падение теплопроводности по сравнению с однородными пластинами кремния и германия за счет сильной гибридизации фононных мод из разных слоев.

### Литература:

1. Tubino R., Piersi L. and Zerbi G. Lattice Dynamics and Spectroscopic Properties by a Valence Force Potencial of Diamondlike Crystals: C, Si, Ge, and Sn\* // The Journal of Chemical Physics, 1972, vol.56, nr.3, p.1022-1039.
2. Musgrave J.P. and Pople J.A. A general valence force field for diamond // Proc. R. Soc. London, 1962, ser. A268, p.474-484.
3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. - Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1978. - 618 с.
4. Аскеров Артур. Фононные свойства квантово-точечных сверхрешёток Si/Ge // Studia Universitatis. Seria: Științe ale naturii. - Chișinău, 2009, nr.6(26), p.231-236.

5. Nika D.L., Zincenco N.D. and Pokatilov E.P. Engineering of Thermal Fluxes in Phonon Mismatched Heterostructures // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2009, vol.4, p.180-185.
6. 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 // J. Nanoelect. Optoelect., 2009, vol.4, p.170-173.
7. Tamura S., Tanaka Y., Maris H. Phonon group velocity and thermal conduction in superlattices // Physical Review B, 1999, vol.60, p.2627-2630.
8. Zincenco N.D., Nika D.L., Pokatilov EP., Balandin A.A. Acoustic phonon engineering of thermal properties of silicon-based nanostructures // Journal of Physics: Conference Series, 2007, vol.92, p.012086-1-012086-4.
9. Nika D.L., Ghosh S., Pokatilov E.P. and A. A. Balandin, Lattice thermal conductivity of graphene flakes: Comparison with bulk graphite // Appl. Phys. Lett., 2009, vol.94, p.203103.

*Автор благодарен за обсуждение результатов исследования и полезные советы ныне покойному профессору Покатилову Е.П. и доктору физ.-матем. наук Нике Д.Л.*

*Prezentat la 23.11.2012*