УДК 536.2.01, 536.21

**Расчет фононных колебаний в кремниевых нанопленках**

**с помощью метода динамики решетки**

*Чжан Гэ, магистр,*

SChiou@126.com

*Лю Шисян, аспирант,*

sxliu98@gmail.com

*Хвесюк Владимир Иванович, д.т.н., профессор,*

*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

Аннотация: В данной работе дисперсионные кривые кремниевых нанопленок рассчитываются методом динамики решетки для изучения колебаний фононов.

Ключевые слова: Кремниевые нанопленки, метод динамики решетки, дисперсионные кривые.

Введение

С развитием наноразмеров термодинамика предоставляет новые и более эффективные методы изучения уникальных физико-химических свойств наноматериалов. В практическом применении приходится учитывать проблемы граничных эффектов и эффектов размера, которые существенно изменяют термодинамическое поведение материалов, поэтому объект наших исследований постепенно переместился от объемных к изучению тонких пленок.

Первоначально мы использовали теорию упругих волн для изучения тонких пленок. Исследование заключается в изучении дисперсионных соотношений волн в однородной тонкой пластине произвольной толщины бесконечного протяжения. Однако недостатком этого подхода является то, что он требует предположения об однородности и непрерывности материала, что, как мы знаем, не всегда имеет место в реальности, и поэтому может привести к неточным результатам.

Осознав потенциальные проблемы, связанные с теорией упругих волн, мы приступили к изучению тонких пленок с помощью динамики решетки. Метод динамики решетки через матрицу силовых постоянных дает возможность понять механические свойства материалов. Преимуществом этого подхода является возможность спуститься на микроскопический уровень и проанализировать механическое поведение на атомном уровне.

Метод расчёта

Элементарная ячейка кремния содержит два атома, которые мы обозначаем буквами *a* и *b* [1]. Повторяющиеся единицы, состоящие из этих двух атомов, позволяют получать более сложные структуры путём трансляции. Атом кремния *b* существует только внутри куба, а атом кремния *a* расположен в вершине и центре грани куба. Атомы в каждой позиции решетки, соответствующей центральному атому (*a* или *b*), имеют соответствующие матрицы силовых констант . Мы рассматриваем только влияние ближайших и вторых ближайших атомов к центральному атому; влияние более удаленных атомов на центральный атом пренебрежимо мало.

n-1

n

1

2

3

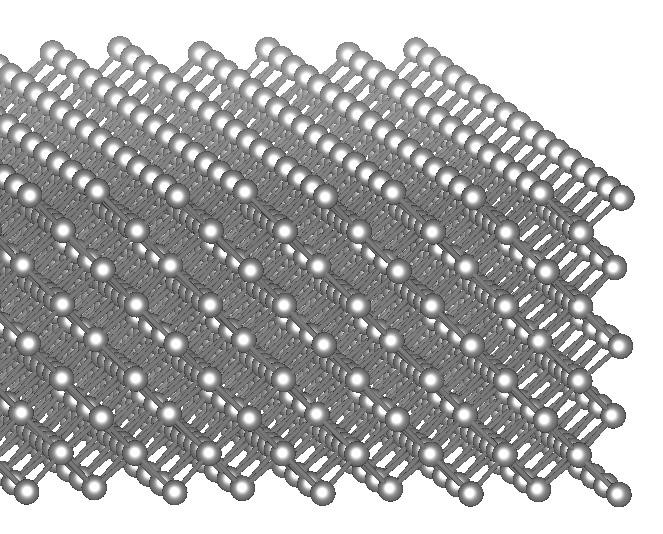
... ...

*= a*

*= b*

*Рис 2 Расположение атомов в кремниевых пленках*

*Рис 1 Расположение первого и второго ближайших атомов*



Если рассматривать атомы, которые могут находиться на одной грани параллельной кремниевой пленке, как один тип атомов, то для пленки толщиной (n-1)\*(a/4) нм существует в общей сложности n типов атомов (n - чётное число). С помощью полученной динамической матрицы нам нужно рассмотреть не более пяти из них, назвав соответствующие им силы ,, , , , которые являются взаимодействиями атомов классов 1, 2, 3, n-1 и n на атоме 1 на *рис 2*. Динамическая матрица имеет следующий вид:

Фононные частоты волнового вектора ***k*** являются собственными значениями динамической матрицы , которая представляет собой просто преобразование Фурье межатомных силовых постоянных в реальном пространстве.

Дисперсионное соотношение получается из решения характерного уравнения . Универсальное выражение для динамической матрицы имеет вид ():

**

В отличие от результатов, полученных в теории упругих волн с постоянной скоростью волны, дисперсионное соотношение здесь имеет тенденцию к уплощению на границе зоны Бриллюэна. Групповая скорость фононов в пленке ниже в объемных, что видно из наклона дисперсионного соотношения.

Выводы

В данной работе предлагается метод расчета фононных колебаний кремниевых нанопленок, основанный на подходе динамики решетки. С помощью этого метода успешно рассчитаны дисперсионные кривые для нанопленок различной толщины, что углубляет понимание фононных колебательных свойств кремниевых материалов и предоставляет вычислительную основу для материалов с аналогичной кристаллической структурой. В случае очень тонких пленок, таких как моноатомные и двухатомные слои, значителен эффект квантового размера, и более точные результаты должны быть рассчитаны методом DFT (Density functional theory). Также важно учитывать влияние внеплоскостных колебательных мод, что станет темой для дальнейших исследований.

Список использованных источников

1. Herman F. Lattice vibrational spectrum of germanium // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1959. (8). C. 405–418.

CALCULATION OF PHONON OSCILLATIONS IN SILICON NANOFILMS

USING LATTICE DYNAMICS METHOD

G. Zhang, S. Liu, V.I. Khesyuk

Abstract: In this paper, dispersion curves of silicon nanofilms are calculated using the lattice dynamics method to study phonon vibrations in terms of atomic interactions.

Key words: Silicon nanofilms, lattice dynamics method, dispersion curves.