



ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОЁМКОСТИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛИНЕЙНОГО И НЕЛИНЕЙНОГО  
ДИСПЕРСИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ

Хвесьюк В.И., Косякова А.В.

В работе проведён анализ результатов расчёта теплоёмкости квантовых точек с использованием модели Дебая (линейной дисперсии из теории упругих волн) и нелинейного дисперсионного соотношения (теория функционала плотности, учитывающая колебания атомарной решётки) в области температур от 2 до 300 К. Подтверждено существенное влияние размеров квантовой точки на теплоёмкость.

Ввиду ограничения по размеру квантовой точки, длины упругих волн в ней должны быть такими, чтобы между границами квантовой точки укладывалось целое число полуволен – вместо интегрирования (как для макроскопического тела) мы суммируем по таким дискретным значениям волнового вектора  $k$ :

$$\overline{C_V}(T) = \frac{3R}{(2\pi)^3 n_a k_B} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \hbar \omega \frac{\partial f_{BE}(\omega, T)}{\partial T} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z,$$

где  $\overline{C_V}$  – удельная молярная теплоёмкость,  $\hbar = h/2\pi$  – приведённая постоянная Планка,  $f_{BE}(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$  – распределение Бозе-Эйнштейна.

Результаты расчётов представлены на рис. 1. (с применением различных дисперсий) и на рис. 2. (линейная дисперсия для QD разных размеров). При температурах более 200 К и с увеличением размеров зависимость приближается к макроскопическому телу.

Разный вид зависимости при использовании двух дисперсионных соотношений согласуется с наличием и отсутствием возможности учёта поверхностных колебаний на свободных и фиксированных границах.

| $k, 1/m$                      | $\omega, 1/c$ | $\overline{\omega}(x) = c_4 x^4 + c_3 x^3 + c_2 x^2 + c_1 x + c_0$<br>$\overline{\omega} = \omega/10^{13}, x = k/k_{max}$ |       |        |        |       |
|-------------------------------|---------------|---|-------|--------|--------|-------|
| Коэффициенты для кремния (Si) |               | $c_0$   | $c_1$ | $c_2$  | $c_3$  | $c_4$ |
| TA                            |               | 0   | 6,759 | -3,353 | -2,288 | 1,702 |
| LA                            |               | 0   | 9,756 | -0,371 | -1,644 | 0     |

Аппроксимация экспериментальных данных, взятая в качестве нелинейного дисперсионного соотношения для расчетов

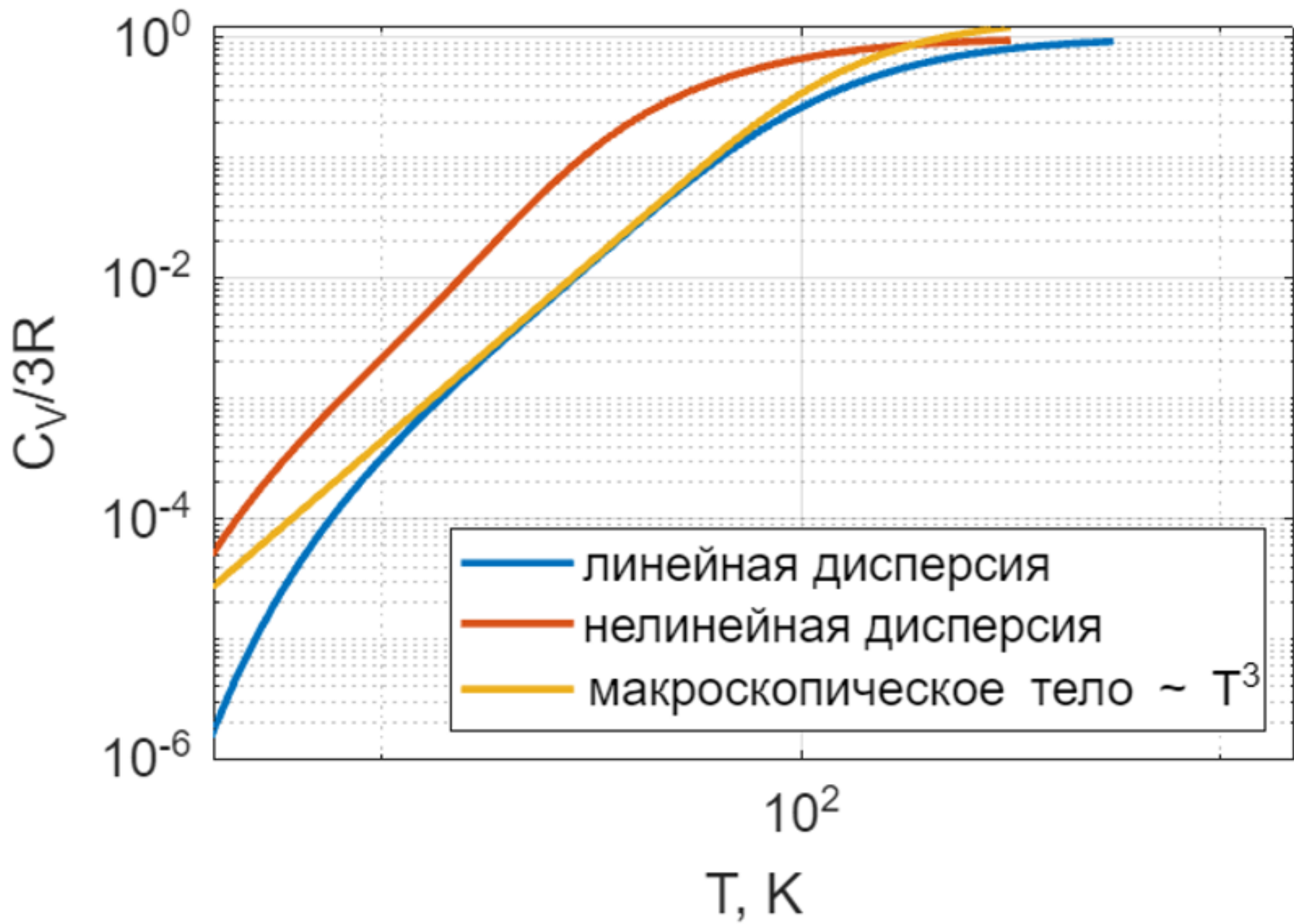


Рис. 1. Теплоёмкость квантовой точки кремния 20x20x20 при использовании разных дисперсионных соотношений

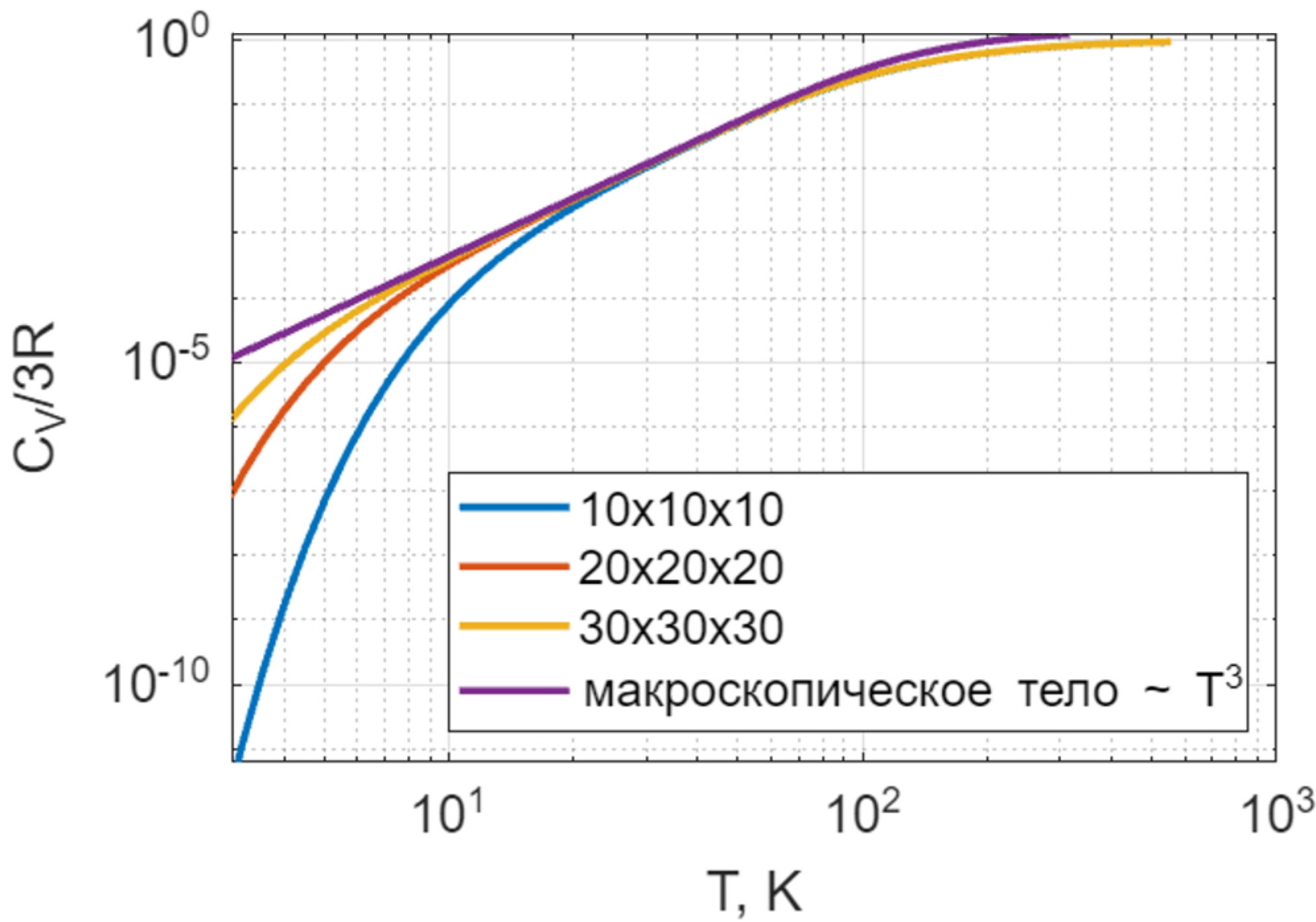


Рис. 2. Теплоёмкость квантовых точек разного размера с использованием линейного дисперсионного соотношения

Вывод

Теплоемкость квантовых точек по модели линейной и нелинейной дисперсий без учета квантово-размерных ограничений дают достаточно точный результат в области температур 200 К – 300 К. Однако, при меньших температурах следует учитывать влияние размеров и конфигурации квантовых точек, поскольку это оказывает значительное влияние на теплоемкость (более 25%).

Литература

1 Mitin V.V., Sementsov D.I., Vagidov N.Z. Quantum mechanics for nanostructures. – Cambridge : Cambridge University Press, 2010 482 p.  
2 Ilic D. I., et al. Phonon Contribution in Thermodynamic Properties of Single Quantum Dot // Acta Physica Polonica A, 2019 V. 136, N. 1 P. 49-54.  
3 Ren S. F., Cheng W. Calculations of surface effects on phonon modes and Raman intensities of Ge quantum dots // Phys. Rev. B, 2002 N. 66 P. 205328