

УДК 621.315.592

## Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов\*

© 2019 г. К. К. Абгарян<sup>1,2,§</sup>, И. С. Колбин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»  
Российской академии наук,*

*ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

<sup>2</sup> *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),  
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

**Аннотация.** В работе проводится вычисление эффективного коэффициента теплопроводности для бинарной полупроводниковой гетероструктуры на примере сверхрешетки GaAs/AlAs для различных периодов слоев и при различных температурах окружающей среды. На рассматриваемых масштабах использование моделей, основанных на законе Фурье, сильно ограничено, т. к. они не учитывают квантовомеханические свойства материалов, что дает сильное расхождение с экспериментальными данными. С другой стороны, использование методов молекулярной динамики позволяет получить точные решения, но они существенно более требовательны к вычислительным ресурсам и требуют решение нетривиальной задачи подбора потенциала. При рассмотрении наноструктур хорошие результаты показали методы, основанные на решении кинетического уравнения Больцмана для фононов, они позволяют получить достаточно точное решение, при этом обладая меньшей вычислительной сложностью, чем методы молекулярной динамики. Для расчета коэффициента теплопроводности в работе используется модель модального подавления, аппроксимирующая решение кинетического уравнения Больцмана для фононов. Дисперсионные параметры и параметры рассеяния фононов получены из первопринципных расчетов. В работе учитываются двух фононные, связанные с изотопическим беспорядком и барьерные, и трех фононные процессы рассеяния. Для повышения точности вычислений, в работе учитывается неоднородность распределения материалов по слоям сверхрешетки. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными, продемонстрировано хорошее соответствие.

**Ключевые слова:** коэффициент теплопроводности, сверхрешетка, полупроводниковая гетероструктура

### Введение

В настоящее время, изучение вопросов теплового переноса в полупроводниковых гетероструктурах является одним из приоритетных направлений исследований в микроэлектронике. Это связано с постоянным ростом частотных характеристик элементной базы, что совместно с миниатюризацией электроники влечет за собой увеличение удельной выделяемой тепловой энергии, которую требуется отводить, чтобы поддерживать работоспособность устройств [1—3].

При рассмотрении наноразмерных структур использование известных подходов к моделированию теплопереноса с использованием закона Фурье сильно ограничено, так как при этом не учитываются квантовомеханические свойства материалов в связи с чем полученные результаты зачастую плохо согласуются с экспериментальными данными [2]. Значительно более точные расчеты можно получить с использованием методов молекулярной динами-

ки [4, 5], что, в свою очередь, сопряжено с высокой вычислительной сложностью алгоритмов, а также с нетривиальной задачей подбора параметров потенциалов межатомного взаимодействия [6] для моделирования конкретных структур и процессов.

Определенным компромиссом в смысле вычислительной сложности и учета микроскопических эффектов можно считать моделирование теплопереноса на основе кинетического уравнения Больцмана. Отдельно стоит выделить гибридные подходы, в частности в работе [7] применяется вычислительная схема на основе кинетического уравнения для сравнительно узкой зоны нагрева, где преобладает бал-

**Абгарян Каринэ Карленовна**<sup>1,2,§</sup> — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), e-mail: kristal83@mail.ru; **Колбин Илья Сергеевич**<sup>1</sup> — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, e-mail: iskolbin@gmail.com

§ Автор для переписки

\* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

листический перенос тепла, и закон Фурье для области диффузного распространения тепла. При этом требуется согласование на границах расчетных зон, что усложняет алгоритм. Однако в рассматриваемой задаче авторам удалось получить существенный прирост скорости, при незначительном уменьшении точности решения.

При моделировании теплопереноса в полупроводниковых гетероструктурах особый интерес представляет кинетическое уравнение Больцмана для фононов, т. к. они являются основными переносчиками тепла в полупроводниках и диэлектриках. При этом одна из проблем при построении вычислительных алгоритмов связана с учетом рассеяния фононов. В общем случае приходится рассматривать сложное интегродифференциальное уравнение. Однако во многих случаях, при решении уравнения Больцмана достаточно учитывать лишь приближения времени релаксации, что существенно упрощает задачу [1, 4].

В такой постановке необходимо решить вопрос, связанный с получением данных по параметрам релаксации. Ранее они рассчитывались полуэмпирически с учетом согласования модельных вычислений с результатами экспериментов. Несмотря на определенные успехи, данный подход весьма трудозатратен, в связи с чем в основном моделировались структуры из простых материалов (как правило, кремний и германий) [8—10]. Значительный прорыв в данном вопросе произошел при комбинировании методов с использованием кинетического уравнения с первопринципными расчетами [1, 11, 12]. При этом требуемые характеристики фононов могут быть получены не из аппроксимации экспериментальных данных, а из первопринципных вычислений, что значительно повышает точность вычислений, открывает возможности эффективного предсказания свойств моделируемых материалов при этом минимизируя различные допущения.

**Метод расчета**

В работе проводится вычисление эффективного коэффициента теплопроводности бинарной гетероструктуры — сверхрешетки. Для этого используется подход описанный в работе [11]. Расчет ведется в приближении виртуального кристалла [14, 15]. В отсутствии температурного градиента и иных термодинамических сил система находится в тепловом равновесии и распределение фононов подчинено закону Бозе—Эйнштейна:

$$f_0(\omega, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}, \tag{1}$$

где  $\omega$  — частота;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $\hbar$  — редуцированная постоянная Планка;  $T$  — темпера-

тура. При наличии теплового градиента распределение фононов отклоняется от равновесного и может быть описано кинетическим уравнением Больцмана для фононов, которое в приближении времени релаксации имеет вид:

$$\frac{f - f_0}{\tau^0} = -\nabla T \mathbf{v} \frac{df_0}{dT}, \tag{2}$$

где  $f$  — неизвестная функция распределения фононов;  $\mathbf{v}$  — групповые скорости фононов;  $\nabla T$  — температурный градиент;  $\tau^0$  — время релаксации. Время релаксации  $\tau^0$  отражает процессы рассеяния фононов. В работе учитываются следующие типы:

1. *Упругое*: рассеяние связанное с изотопическим беспорядком и барьерное рассеяние;
2. *Ангармонические процессы*: трехфононные взаимодействия, абсорбция (2 фонона сливаются в 1) и эмиссия (один фонон распадается на 2).

Стоит отметить, что это не все существующие типы рассеяния, в частности не учитываются электрон-фононные взаимодействия, четырехфононные процессы, рассеяние на границе и т. д., однако их вклад достаточно мал, чтобы им можно было пренебречь [16]. С учетом рассматриваемых типов рассеяния время релаксации может быть выражено как

$$\frac{1}{\tau_\lambda^0} = \frac{1}{\tau_\lambda^+} + \frac{1}{\tau_\lambda^-} + \frac{1}{\tau_\lambda^a} + \frac{1}{\tau_\lambda^b}, \tag{3}$$

где индекс  $\lambda$  включает в себя индекс фононной ветви  $\mathbf{p}$  и волновой вектор  $\mathbf{q}$ ;  $\tau^+$ ,  $\tau^-$  — влияние процессов абсорбции и эмиссии, соответственно;  $\tau^a$  — вклад от изотопического беспорядка;  $\tau^b$  — барьерное рассеяние. Расчет времени релаксации от трехфононных процессов проводятся по формулам [16, 17]:

$$\frac{1}{\tau_\lambda^+} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda'\lambda''}^+ \frac{\hbar\pi}{4} \frac{f_0' - f_0''}{\omega_\lambda \omega_{\lambda'} \omega_{\lambda''}} |V_{\lambda\lambda'\lambda''}^+|^2 \delta(\omega_\lambda + \omega_{\lambda'} - \omega_{\lambda''}), \tag{4}$$

$$\frac{1}{\tau_\lambda^-} = \frac{1}{N} \frac{1}{2} \sum_{\lambda'\lambda''}^- \frac{\hbar\pi}{4} \frac{f_0' + f_0'' + 1}{\omega_\lambda \omega_{\lambda'} \omega_{\lambda''}} |V_{\lambda\lambda'\lambda''}^-|^2 \delta(\omega_\lambda - \omega_{\lambda'} - \omega_{\lambda''}), \tag{5}$$

где  $\delta$  — дельта-функция Дирака. Вычисления ведутся для дискретизированной зоны Бриллюэна: однородной решетки  $\mathbf{q}$ -точек. Матрица рассеяния  $V$  рассчитывается как [18]

$$V_{\lambda\lambda'\lambda''}^\pm = \sum_i \sum_{j,k} \sum_{\alpha\beta\gamma} \Phi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} \frac{e_\lambda^\alpha(i) e_{p',\pm\mathbf{q}'}^\beta(j) e_{p'',-\mathbf{q}''}^\gamma(k)}{\sqrt{m_i m_j m_k}}, \tag{6}$$

где  $i, j, k$  — атомные индексы;  $\alpha, \beta, \gamma$  — координаты;  $m$  — массы атомов;  $\Phi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma}$  — ангармонические силовые константы;  $e_\lambda^\alpha$  — компонент  $\alpha$  собственного вектора моды  $\lambda$ .

Расчет барьерного члена  $\tau^b$  производится в соответствии с работой [19]. Важно отметить, что влияние барьерного компонента не зависит от послыонного распределения составных веществ в сверхрешетке,

в отличие от  $\tau^a$ . Расчет времени релаксации  $\tau^a$  производится по формулам

$$\frac{1}{\tau_\lambda^\alpha} = \frac{1}{N} \frac{\pi \omega_\lambda^2}{2} \sum_i g(i) |e_\lambda^*(i) e_{\lambda'}(i)|^2 \delta(\omega_\lambda - \omega_{\lambda'}), \quad (7)$$

$$g(i) = \frac{(m_1 - m_2)^{N_{\text{periods}}}}{N_{\text{periods}}} \sum_i [X(i)(1 - X(i))], \quad (8)$$

где  $X$  — относительная концентрация второго материала в слое. Разрешенные частоты фононов  $\omega$  и собственные векторы  $e$ , могут быть получены из уравнения [18]:

$$\omega^2 e_\lambda^\alpha(j) = - \sum_{k\beta} \frac{1}{\sqrt{m_j m_k}} D_{jk}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) e_\lambda^\beta(k), \quad (9)$$

где  $D_{jk}$  — динамическая матрица, которая для полярных материалов может быть вычислена как [18, 20]

$$D_{jk}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}(k) - \mathbf{r}(j))] \times \sum_Q \frac{\Psi_{jk}^{\alpha\beta}(P, Q)}{\sqrt{m_j m_k}} \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{R}(Q) - \mathbf{R}(P))], \quad (10)$$

$$\Psi_{jk}^{\alpha\beta}(P, Q) = \Phi_{jk}^{\alpha\beta}(P, Q) + \phi_{jk}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}), \quad (11)$$

$$\phi_{jk}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \frac{4\pi e [\mathbf{Z}(i)\mathbf{q}]_\alpha [\mathbf{Z}(k)\mathbf{q}]_\beta}{\Omega \mathbf{q} \epsilon \mathbf{q}}, \quad (12)$$

где  $\Phi_{jk}$  — гармонические силовые константы;  $\mathbf{Z}$  — тензор эффективных зарядов Борна [22];  $\epsilon$  — диэлектрический тензор.

Таким образом, из первопринципных расчетов требуется получить: кристаллическую структуру рассматриваемых материалов, гармонические и ангармонические силовые константы, диэлектрический тензор и тензор эффективных зарядов Борна; после чего, используя формулы (3)—(12) можно вычислить время релаксации  $\tau^0$ .

Расчет эффективного коэффициента теплопроводности можно произвести с помощью функции модального подавления, дискретная форма которой имеет вид [1]

$$\kappa(L) = \sum_\lambda S_\lambda C_\lambda \|\mathbf{v}_k\| \Lambda_\lambda \cos^2(\theta_\lambda), \quad (13)$$

где  $\theta$  — угол между групповой скоростью и направлением теплопереноса, функция подавления  $S$  для коэффициента эффективной теплопроводности перпендикулярной направлению роста (*cross-plane*) гетероструктуры вычисляется как [11]:

$$S_\lambda = \frac{1}{1 + 2K_\lambda}, \quad (14)$$

где число Кнудсена  $K$  для структуры шириной  $L$  и длина свободного пробега  $\Lambda$ , могут быть вычислены

$$K_\lambda = \frac{\Lambda_\lambda |\cos \theta_\lambda|}{L}, \quad (15)$$

$$\Lambda_\lambda = \|\mathbf{v}_k\| \tau_\lambda^0, \quad (16)$$

Расчет коэффициента теплопроводности параллельной росту гетероструктуры (*in-plane*) приводится в [1].

### Результаты расчетов, обсуждение

В качестве примера приложения описанной техники рассмотрим расчет теплопроводности бинарной гетероструктуры GaAs/AlAs для различных периодов сверхрешетки. В результате первопринципных расчетов получены: расположения атомов, пространственные производные потенциальной энергии 2 и 3-го порядка, диэлектрический тензор и эффективные заряды Борна. Перечисленные параметры получены из открытой библиотеки проекта ALMA (<http://www.almabte.eu/index.php/database/>). Моделирование велось с использованием программного пакета almaBTE [1] для GaAs/AlAs на решетке  $24 \times 24 \times 24$  [14]. Результаты расчетов и данные эксперимента [23] для различных периодов сверхрешетки представлены ниже на рис. 1. Для сравнения: при 300 К коэффициент теплопроводности при GaAs равен 56 Вт/(м·К), а AlAs — 90 Вт/(м·К).

Как видно из рис. 1, полученные вычислительные данные достаточно хорошо согласуются с результатами экспериментов [23], что позволяет судить об эффективности подхода. Стоит отметить, что в данном случае моделировались гетероструктуры с идеальными границами, в реальности, в процессе выращивания гетероструктур формируются интерфейсы с достаточно сложной формой, что оказывает эффект на результирующую теплопроводность. Таким образом, в частности, можно объяснить сравнительно низкую точность для образца с периодом  $10 \times 10$ .

Для увеличения точности расчетов требуется наличие профиля послойного распределения составных веществ в гетероструктуре, в таком случае это может быть учтено в формуле (8). В настоящей работе они выбирались полуэмпирически из описания эксперимента в [23]. Выбранные профили и полученный результат показаны на рис. 2.

Как видно из рис. 2, точность решения значительно увеличилась: если для идеального профиля (см. рис. 2, а) абсолютное среднеквадратичное отклонение от результатов экспериментов составляло 5,2 Вт/(м·К) (относительное 21 %), то для выбранных концентраций (см. рис. 2, б и в) они составили 0,76 Вт/(м·К) (относительное 3 %) и 1,1 Вт/(м·К) (относительное 4 %), соответственно. Более прямой и точный подход заключается в экспериментальном установлении профиля распределения, что продемонстрировано в работе [19] для гетероструктуры InAs/GaAs.

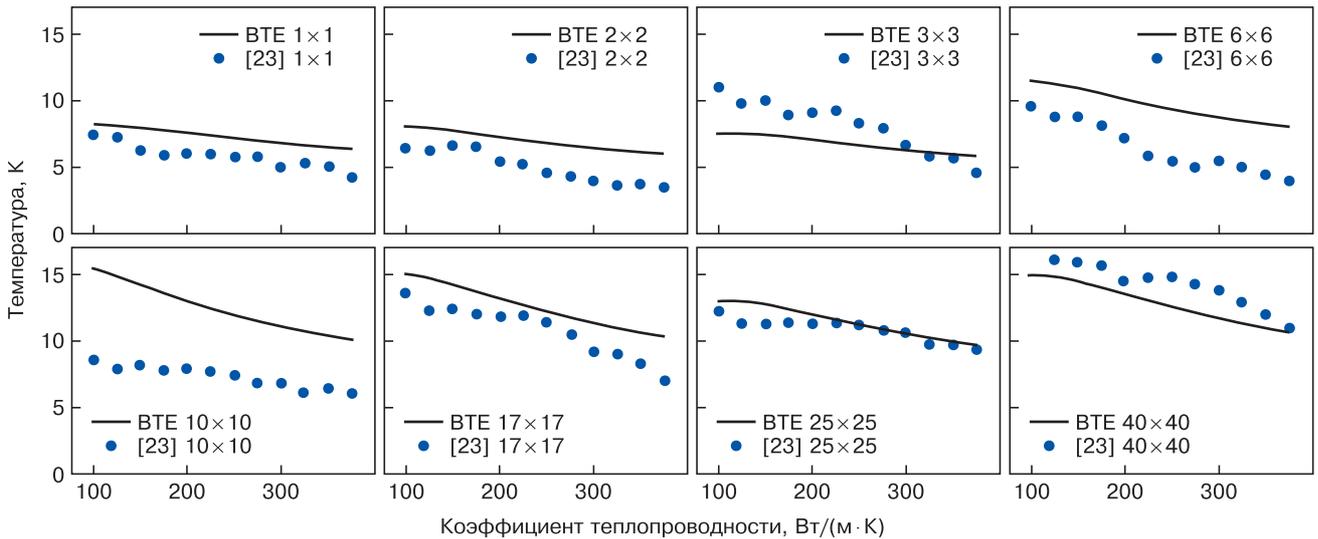


Рис. 1. Сравнение рассчитанного (BTE — Boltzmann Transport Equation) и экспериментально полученного в работе [23] эффективного коэффициента теплопроводности для различных периодов сверхрешетки GaAs/AlAs

Fig. 1. Comparison of the calculated (BTE) and experimentally [23] effective coefficient of thermal conductivity for different periods of the GaAs/AlAs superlattice

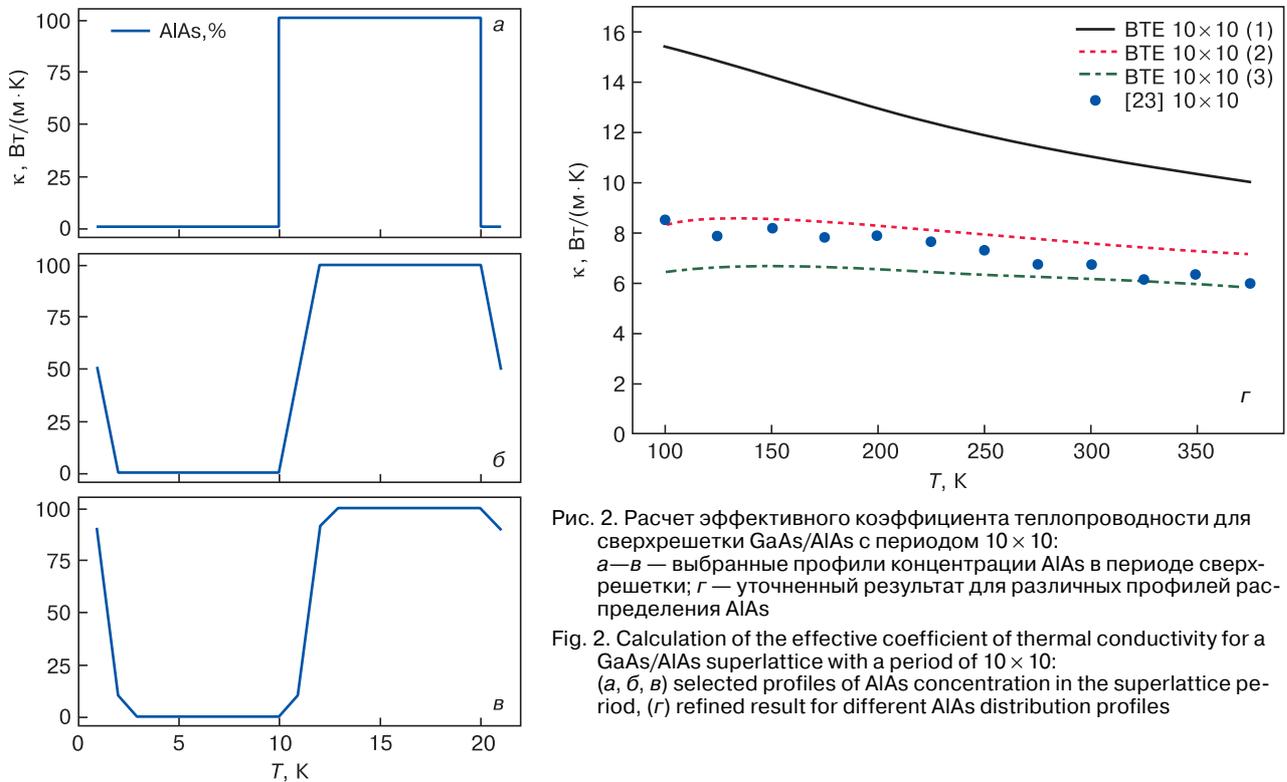


Рис. 2. Расчет эффективного коэффициента теплопроводности для сверхрешетки GaAs/AlAs с периодом  $10 \times 10$ : а—в — выбранные профили концентрации AlAs в периоде сверхрешетки; г — уточненный результат для различных профилей распределения AlAs

Fig. 2. Calculation of the effective coefficient of thermal conductivity for a GaAs/AlAs superlattice with a period of  $10 \times 10$ : (a, б, в) selected profiles of AlAs concentration in the superlattice period, (г) refined result for different AlAs distribution profiles

**Аппроксимационная нейросетевая модель**

Для получения промежуточных значений эффективного коэффициента теплопроводности удобно воспользоваться аппроксимационными моделями. Воспользуемся двумерной моделью, которая на вход получает ширины слоев и температуру, а на выходе выдает приближенное значение коэффициента  $\kappa$ . В частности, можно воспользоваться сетями радиально базисных функций, т. к. они обеспечивают высокую точность при сравнительно небольшом количестве базисов [24, 25], в этом случае прибли-

женное значение эффективного коэффициента теплопроводности можно выразить в виде:

$$\kappa(L, T) = \sum_i^m \omega_i \phi(\epsilon_i, \|r - r_i^0\|), \quad (17)$$

где  $m$  — число базисов аппроксимации;  $\epsilon$  — «ширина» базиса;  $r$  — координата, включающая  $T$  и  $L$ ;  $r^0$  — центр базиса. Перед проведением расчетов целесообразно произвести обезразмеривание, т. к. в противном случае в одном уравнении будут разноразмерные величины  $T$  и  $L$ . При этом, будем варьировать только весовые коэффициенты, а центры

базисов и «ширины» останутся фиксированными, тогда получаем линейную систему

$$AX = B \tag{18}$$

где матрица  $A$  содержит вычисления базисных функций в  $n$  контрольных точках:

$$A = \begin{pmatrix} \phi_{1,1} & \phi_{1,2} & \dots & \phi_{1,n} \\ \phi_{2,1} & \phi_{2,2} & \dots & \phi_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{m,1} & \phi_{m,2} & \dots & \phi_{m,n} \end{pmatrix}, \tag{19}$$

где для безразмерных  $L$  и  $T$ :

$$\phi_{i,j} = \phi(\varepsilon, T_i - T_j^0, L_i - T_j^0), \tag{20}$$

вектор  $X$  состоит из искоемых значений весовых коэффициентов

$$X = [\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m]^T, \tag{21}$$

а в векторе  $B$  располагаются вычисленные значения эффективной теплопроводности в контрольных точках

$$B = [\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_n]^T. \tag{22}$$

Тогда при минимизации по методу наименьших квадратов получаем

$$X = (A^T A)^{-1} A^T B. \tag{23}$$

Отметим, что при использовании более компактной нейросетевой модели для подбора всех параметров можно применить методы нелинейной оптимизации [27], но это требует выбора начального приближения, а также решения вопроса глобального поиска оптимума. В качестве радиально-базисных функций в работе рассматривались:

$$\phi(\varepsilon, r) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}, \text{ мультиквадрики [26],} \tag{24}$$

**Абсолютное среднеквадратичное отклонение аппроксимированного коэффициента теплопроводности**  
 [Absolute standard deviation of the approximated thermal conductivity coefficient]

Радиально-базисная функция	Сетевая модель						
	2 × 2	3 × 3	4 × 4	5 × 5	6 × 6	7 × 7	8 × 8
MQ	1,4288	<b>1,0264</b>	1,0162	0,9014	0,7189	0,1615	0,0557
IMQ	1,1790	1,0335	<b>1,0117</b>	<b>0,8979</b>	<b>0,7035</b>	<b>0,1527</b>	0,0382
G	<b>1,1500</b>	1,0408	1,0210	0,9207	0,7623	0,1897	0,0041
MQ-N	1,2561	1,0291	1,0133	0,8983	0,7121	0,1585	0,0568
IMQ-N	1,2558	1,0282	1,0126	0,9006	0,7095	0,1555	0,0373
G-N	1,2505	1,0305	1,0249	0,9286	0,7798	0,2008	<b>0,0022</b>

Обозначения: MQ — мультиквадрики, IMQ — обратные мультиквадрики, G — функции Гаусса, с учетом (суффикс — N) и без нормализации. Жирным выделены минимальные значения для фиксированного размера.

$$\phi(\varepsilon, r) = \exp(-\varepsilon^2 r^2), \text{ функции Гаусса,} \tag{25}$$

$$\phi(\varepsilon, r) = \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}}, \text{ обратные мультиквадрики.} \tag{26}$$

Также были рассмотрены классические и нормализованные [27, 28] радиально-базисные сети

$$\kappa^{\text{norm}}(L, T) = \frac{\sum_i^m \omega_i \phi(\varepsilon_i, \|r - r_i^0\|)}{\sum_i^m \phi(\varepsilon_i, \|r - r_i^0\|)}. \tag{27}$$

В таблице представлены результаты вычислений среднеквадратичного отклонения построенной нейросетевой модели от вычисленных в контрольных точках значений для различного числа и типа базисов. При расчетах центры базисов размещались по сетке с равным шагом в рассматриваемой области  $L, T$ . Параметр «ширины» выбран единичный.

Из таблицы видно, что достаточно высокая точность аппроксимации появляется при 49 нейронах в сети (7 × 7), при этом относительная погрешность имеет порядок 1—2 %. Для минимально рассматриваемой сети из 4 нейронов (2 × 2) погрешность на уровне 12—15 % в зависимости от радиально-базисной функции. Отметим, что нормализация сетей с гауссовой функцией для случая 8 × 8 дала двукратное уменьшение погрешности.

**Заключение**

В работе был проведен расчет эффективного коэффициента теплопроводности многослойной гетероструктуры с использованием функции модального подавления на примере бинарных гетероструктур GaAs/AlAs. Проведено сравнение вычисленных значений с экспериментальными данными, показана хорошая точность метода. Продемонстрировано, что учет послойного распределения материалов гетероструктуры существенно повышает соответствие экспериментальных и вычисленных данных. По результатам расчетов построена аппроксимационная нейросетевая модель на основе радиально-базисных функций, рассмотрено влияние на точность выбора базисных функций, а также числа нейроэлементов и нормализации выхода приближающей модели. Для рассматриваемой задачи хорошая точность достигнута для сети из 49 нейронов.

**Библиографический список**

1. Carrete J., Vermeersch B., Katre A., van Roekeghem A., Wang T., Madsen G. K. H., Mingo N. *almaBTE: A solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials* // *Computer Physics Communications*. 2017. V. 220. P. 351—362. DOI: 10.1016/j.cpc.2017.06.023

2. Скрябин А. С., Хвесьюк В. И. Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, Вып. 3. С. 447—471. DOI: 10.7868/S0040364417030127
3. van Roekeghem A., Vermeersch B., Carrete J., Mingo N. Thermal resistance of GaN/AlN graded interfaces // Phys. Rev. Appl. 2019. V. 11, Iss. 3. P. 034036. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.11.034036
4. McGaughy A. J. H., Kaviani M. Phonon transport in molecular dynamics simulations: formulation and thermal conductivity prediction // Advances in Heat Transfer. 2006. V. 39. P. 169—255. DOI: 10.1016/S0065-2717(06)39002-8
5. Zhang Xing-Li, Sun Zhao-Wei. Molecular dynamics simulation on thermal boundary resistance of superlattice structure // J. Aero. Mat. 2011. V. 31, N 4. P. 7—10. DOI: 10.3969/j.issn.1005-5053.2011.4.002
6. Абгарян К. К., Евтушенко Ю. Г., Мутигуллин И. В., Уваров С. И. Молекулярно-динамическое моделирование начальных этапов процесса нитридации поверхности Si(111) в атмосфере NH<sub>3</sub> // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18, № 4. С. 267—272. DOI: 10.17073/1609-3577-2015-4-267-272
7. Vallabhaneni A. K., Chen L., Gupta M. P., Kumar S. Solving nongray Boltzmann transport equation in gallium nitride // J. Heat Transfer. 2017. V. 139, Iss. 10. P. 102701. DOI: 10.1115/1.4036616
8. Loy J. M., Murthy J. Y., Singh D. A fast hybrid Fourier-Boltzmann transport equation solver for nongray phonon transport // J. Heat Transfer. 2013. V. 135, Iss. 1. P. 011008. DOI: 10.1115/1.4007654
9. Chung J. D., McGaughy A. J. H., Kaviani M. Role of phonon dispersion in lattice thermal conductivity modeling // J. Heat Transfer. 2004. V. 126, N 3. P. 376—380. DOI: 10.1115/1.1723469
10. Баринов А. А., Чжан К., Бинь Лю, Хвесьюк В. И. Развитие методов расчета теплопроводности тонких пленок // Наука и Образование: Научное Издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2017. № 6. С. 56—71.
11. Vermeersch B., Carrete J., Mingo N. Cross-plane heat conduction in thin films with *ab-initio* phonon dispersions and scattering rates // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108, Iss. 19. P. 193104. DOI: 10.1063/1.4948968
12. Broido D. A., Malorny M., Birner G., Mingo N., Stewart D. A. Intrinsic lattice thermal conductivity of semiconductors from first principles // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 91, Iss. 23. P. 231922. DOI: 10.1063/1.2822891
13. Shindé S. L., Srivastava G. P. (Eds.). Length-Scale Dependent Phonon Interactions. New York: Springer, 2014. 296 p. DOI: 10.1007/978-1-4614-8651-0
14. Bellaiche L., Vanderbilt D. Virtual crystal approximation revisited: Application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites // Phys. Rev. B. 2000. V. 61, Iss. 12. P. 7877—7882. DOI: 10.1103/physrevb.61.7877
15. Li W., Lindsay L., Broido D. A., Stewart D. A., Mingo N. Thermal conductivity of bulk and nanowire Mg<sub>2</sub>Si<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub> alloys from first principles // Phys. Rev. B. 2012. V. 86, Iss. 17. P. 174307. DOI: 10.1103/physrevb.86.174307
16. Li W., Carrete J., Katcho N. A., Mingo N. ShengBTE: A solver of the Boltzmann transport equation for phonons // Computer Physics Communications. 2014. V. 185, Iss. 6. P. 1747—1758. DOI: 10.1016/j.cpc.2014.02.015
17. Kundu A., Mingo N., Broido D. A., Stewart D. A. Role of light and heavy embedded nanoparticles on the thermal conductivity of SiGe alloys // Phys. Rev. B. 2011. V. 84, Iss. 12. P. 125426. DOI: 10.1103/physrevb.84.125426
18. Ward A., Broido D. A., Stewart D. A., Deinzer G. *Ab initio* theory of the lattice thermal conductivity in diamond // Phys. Rev. B. 2009. V. 80, Iss. 12. P. 125203. DOI: 10.1103/physrevb.80.125203
19. Carrete J., Vermeersch B., Thumfart L., Kakodkar R. R., Trevisi G., Frigeri P., Seravalli L., Feser J. P., Rastelli A., Mingo N. Predictive design and experimental realization of InAs/GaAs superlattices with tailored thermal conductivity // J. Phys. Chem. C. 2018. V. 122, N 7. P. 4054—4062. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b11133
20. Wang Y., Shang S.-L., Fang H., Liu Z.-K., Chen L.-Q. First-principles calculations of lattice dynamics and thermal properties of polar solids // Npj Computational Materials. 2016. V. 2, Art. No. 16006. DOI: 10.1038/npjcompumats.2016.6
21. Wang Y., Wang J. J., Wang W. Y., Mei Z. G., Shang S. L., Chen L. Q., Liu Z. K. A mixed-space approach to first-principles calculations of phonon frequencies for polar materials // J. Phys.: Condens. Matter. 2010. V. 22, N 20. P. 202201. DOI: 10.1088/0953-8984/22/20/202201
22. Spaldin N. A. A beginner's guide to the modern theory of polarization // J. Solid State Chem. 2012. V. 195. P. 2—10. DOI: 10.1016/j.jssc.2012.05.010
23. Capinski W. S., Maris H. J., Ruf T., Cardona M., Ploog K., Katzer D. S. Thermal-conductivity measurements of GaAs/AlAs superlattices using a picosecond optical pump-and-probe technique // Phys. Rev. B. 1999. V. 59, N 12. P. 8105—8113. DOI: 10.1103/physrevb.59.8105
24. Benaim M. On functional approximation with normalized Gaussian units // Neural Computation. 1994. V. 6, Iss. 2. P. 319—333. DOI: 10.1162/neco.1994.6.2.319
25. Haykin S. S. Neural Networks: A Comprehensive Foundation. Prentice-Hal, 1999. 936 p.
26. Hardy R. L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces // J. Geophysical Research. 1971. V. 76, Iss. 8. P. 1905—1915. DOI: 10.1029/JB076i008p01905
27. Vasilyev A. N., Kolbin I. S., Reviznikov D. L. Meshfree computational algorithms based on normalized radial basis functions // Advances in Neural Networks – ISNN 2016. 13<sup>th</sup> International Symposium on Neural Networks (St. Petersburg, Russia). Cham (Switzerland): Springer, 2016. P. 583—591. DOI: 10.1007/978-3-319-40663-3\_67
28. Bugmann G. Normalized Gaussian radial basis function networks // Neurocomputing. 1998. V. 20, N 1-3. P. 97—110. DOI: 10.1016/S0925-2312(98)00027-7

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №№ 19-08-01191А и 18-29-03100. Для расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

*Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering.* 2019, vol. 22, no. 3, pp. 190—196. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-3-190-196

## Calculation of the effective thermal conductivity of a superlattice based on the Boltzmann transport equation using first-principle calculations

K. K. Abgaryan<sup>1,2,§</sup>, I. S. Kolbin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

<sup>2</sup> Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe shosse, Moscow, 125993, Russia

**Abstract.** In this work, we calculate the effective thermal conductivity coefficient for a binary semiconductor heterostructure using the GaAs/AlAs superlattice as an example. Different periods of layers and different ambient temperatures are considered. At the scale under consideration, the use of models based on the Fourier law is very limited, since they do not

take into account the quantum–mechanical properties of materials, which gives a strong discrepancy with experimental data. On the other hand, the use of molecular dynamics methods allows us to obtain accurate solutions, but they are significantly more demanding on computing resources and also require solving a non–trivial problem of potential selection. When considering nanostructures, good results were shown by methods based on the solution of the Boltzmann transport equation for phonons; they allow one to obtain a fairly accurate solution, while having less computational complexity than molecular dynamics methods. To calculate the thermal conductivity coefficient, a modal suppression model is used that approximates the solution of the Boltzmann transport equation for phonons. The dispersion parameters and phonon scattering parameters are obtained from first–principle calculations. The work takes into account 2–phonon (associated with isotopic disorder and barriers) and 3–phonon scattering processes. To increase the accuracy of calculations, the non–digital profile of the distribution of materials among the layers of the superlattice is taken into account. The obtained results are compared with experimental data showing good agreement.

**Keywords:** thermal conductivity coefficient, superlattice, semiconductor heterostructure

### References

- Carrete J., Vermeersch B., Katre A., van Roekeghem A., Wang T., Madsen G. K. H., Mingo N. almaBTE : A solver of the space–time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials. *Computer Physics Communications*, 2017, vol. 220, pp. 351–362. DOI: 10.1016/j.cpc.2017.06.023
- Khvesyuk V. I., Skryabin A. S. Heat conduction in nanostructures. *High Temperature*, 2017, vol. 55, no. 3, pp. 434–456. DOI: 10.1134/S0018151X17030129
- van Roekeghem A., Vermeersch B., Carrete J., Mingo N. Thermal resistance of GaN/AlN graded interfaces. *Phys. Rev. Appl.*, 2019, vol. 11, no. 3, p. 034036. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.11.034036
- McGaughey A. J. H., Kaviani M. Phonon transport in molecular dynamics simulations: formulation and thermal conductivity prediction. *Advances in Heat Transfer*, 2006, vol. 39, pp. 169–255. DOI: 10.1016/S0065-2717(06)39002-8
- Zhang Xing–Li, Sun Zhao–Wei. Molecular dynamics simulation on thermal boundary resistance of superlattice structure. *J. Aero. Mat.*, 2011, vol. 31, no. 4, pp. 7–10. DOI: 10.3969/j.issn.1005-5053.2011.4.002
- Abgaryan K. K., Evtushenko Yu. G., Mutigullin I. V., Uvarov S. I. Molecular dynamic modeling of the initial stages of Si(111) surface nitridization in NH<sub>3</sub> atmosphere. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*, 2015, vol. 18, no. 4, pp. 267–272. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2015-4-267-272
- Vallabhaneni A. K., Chen L., Gupta M. P., Kumar S. Solving nongray Boltzmann transport equation in gallium nitride. *J. Heat Transfer*, 2017, vol. 139, no. 10, p. 102701. DOI: 10.1115/1.4036616
- Loy J. M., Murthy J. Y., Singh D. A fast hybrid Fourier–Boltzmann transport equation solver for nongray phonon transport. *J. Heat Transfer*, 2013, vol. 135, no. 1, p. 011008. DOI: 10.1115/1.4007654
- Chung J. D., McGaughey A. J. H., Kaviani M. Role of phonon dispersion in lattice thermal conductivity modeling. *J. Heat Transfer*, 2004, vol. 126, no. 3, pp. 376–380. DOI: 10.1115/1.1723469
- Barinov A. A., Zhang K., Lu B., Khvesyuk V. I. Development of in–plane thermal conductivity calculation methods in thin films. *Science and Education of Bauman MSTU*. 2017, no. 6, pp. 56–71. (In Russ.)
- Vermeersch B., Carrete J., Mingo N. Cross–plane heat conduction in thin films with *ab–initio* phonon dispersions and scattering rates. *Appl. Phys. Lett.*, 2016, vol. 108, no. 19, p. 193104. DOI: 10.1063/1.4948968
- Broido D. A., Malorny M., Birner G., Mingo N., Stewart D. A. Intrinsic lattice thermal conductivity of semiconductors from first principles. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, vol. 91, no. 23, p. 231922. DOI: 10.1063/1.2822891
- Shindé S. L., Srivastava G. P. (Eds.). Length–Scale Dependent Phonon Interactions. New York: Springer, 2014, 296 p. DOI: 10.1007/978-1-4614-8651-0
- Bellaiche L., Vanderbilt D. Virtual crystal approximation revisited: Application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites. *Phys. Rev. B*, 2000, vol. 61, no. 12, pp. 7877–7882. DOI: 10.1103/physrevb.61.7877
- Li W., Lindsay L., Broido D. A., Stewart D. A., Mingo N. Thermal conductivity of bulk and nanowire Mg<sub>2</sub>Si<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub> alloys from first principles. *Phys. Rev. B*, 2012, vol. 86, no. 17, p. 174307. DOI: 10.1103/physrevb.86.174307
- Li W., Carrete J., Katcho N. A., Mingo, N. ShengBTE: A solver of the Boltzmann transport equation for phonons. *Computer Physics Communications*, 2014, vol. 185, no. 6, pp. 1747–1758. DOI: 10.1016/j.cpc.2014.02.015
- Kundu A., Mingo N., Broido D. A., Stewart D. A. Role of light and heavy embedded nanoparticles on the thermal conductivity of SiGe alloys. *Phys. Rev. B*, 2011, vol. 84, no. 12, p. 125426. DOI: 10.1103/physrevb.84.125426
- Ward A., Broido D. A., Stewart D. A., Deinzer G. *Ab initio* theory of the lattice thermal conductivity in diamond. *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 80, no. 12, p. 125203. DOI: 10.1103/physrevb.80.125203
- Carrete J., Vermeersch B., Thumfart L., Kakodkar R. R., Trevisi G., Frigeri P., Seravalli L., Feser J. P., Rastelli A., Mingo N. Predictive design and experimental realization of InAs/GaAs superlattices with tailored thermal conductivity. *J. Phys. Chem. C*, 2018, vol. 122, no. 7, pp. 4054–4062. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b11133
- Wang Y., Shang S.–L., Fang H., Liu Z.–K., Chen L.–Q. First–principles calculations of lattice dynamics and thermal properties of polar solids. *Npj Computational Materials*, 2016, vol. 2, art. no. 16006. DOI: 10.1038/npjcompumats.2016.6
- Wang Y., Wang J. J., Wang W. Y., Mei Z. G., Shang S. L., Chen L. Q., Liu Z. K. A mixed–space approach to first–principles calculations of phonon frequencies for polar materials. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2010, vol. 22, no. 20, p. 202201. DOI: 10.1088/0953-8984/22/20/202201
- Spaldin N. A. A beginner’s guide to the modern theory of polarization. *J. Solid State Chem.*, 2012, vol. 195, pp. 2–10. DOI: 10.1016/j.jssc.2012.05.010
- Capinski W. S., Maris H. J., Ruf T., Cardona M., Ploog K., Katzer D. S. Thermal–conductivity measurements of GaAs/AlAs superlattices using a picosecond optical pump–and–probe technique. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, no. 12, pp. 8105–8113. DOI: 10.1103/physrevb.59.8105
- Benaim M. On functional approximation with normalized Gaussian units. *Neural Computation*, 1994, vol. 6, no. 2, pp. 319–333. DOI: 10.1162/neco.1994.6.2.319
- Haykin S. S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice–Hall, 1999, 936 p.
- Hardy R. L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *J. Geophysical Res.*, 1971, vol. 76, no. 8, pp. 1905–1915. DOI: 10.1029/JB076i008p01905
- Vasilyev A. N., Kolbin I. S., Reviznikov D. L. Meshfree computational algorithms based on normalized radial basis functions. *Advances in Neural Networks – ISNN 2016. 13<sup>th</sup> International Symposium on Neural Networks (St. Petersburg, Russia)*. Cham (Switzerland): Springer, 2016, pp. 583–591. DOI: 10.1007/978-3-319-40663-3\_67
- Bugmann G. Normalized Gaussian radial basis function networks. *Neurocomputing*, 1998, vol. 20, no. 1–3, pp. 97–110. DOI: 10.1016/S0925-2312(98)00027-7

**Acknowledgments.** This work was supported by grants from the Russian Foundation for Basic Research Nos. 19–08–01191A and 18–29–03100. For the calculations, we used the computing cluster of the Federal Research Center of the Institute of Management of the Russian Academy of Sciences.

### Information about authors:

**Karine K. Abgaryan**<sup>1,2,\*</sup>: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Chief Researcher, Head of the Department (kristal83@mail.ru); **Ilya S. Kolbin**<sup>1</sup>: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Researcher (iskolbin@gmail.com)

\* Corresponding author

Received December 26, 2019