

포논 분산이 열전달 모델에 미치는 영향

정 재 동*

(2003년 2월 24일 접수, 2003년 6월 11일 심사완료)

Impact of Phonon Dispersion on Thermal Conductivity Model

Jae Dong Chung

Key Words: Thermal Conductivity(열전도율), Phonon(포논), Dispersion Relation(분산관계), Relaxation Time(완화시간)

Abstract

The effects of (1) phonon dispersion on thermal conductivity model and (2) differentiation of group velocity and phase velocity are examined for germanium. The results show drastic change of thermal conductivity regardless of the same relaxation time model. Also the contribution of transverse acoustic (TA) phonon and longitudinal acoustic (LA) phonon on the thermal conductivity at high temperatures is reassessed by considering more rigorous dispersion model. Holland model, which is commonly used for modeling thermal conductivity, underestimates the scattering rate for TA phonon at high frequency. This leads the conclusion that TA is dominant heat transfer mode at high temperatures. But according to the rigorous consideration of phonon dispersion, the reduction of thermal conductivity is much larger than the estimation of Holland model, thus the TA at high frequency is expected to be no more dominant heat transfer mode. Another heat transfer mechanism may exist at high temperatures. Two possible explanations are the roles of (1) Umklapp scattering of LA phonon at high frequency and (2) optical phonon.

기호설명	그리스문자
a : 가속도	α, β : 상수
f : 분포함수	θ_D : Debye 온도
\hbar : Planck 상수/ 2π	τ : 완화시간 (relaxation time)
k : 열전도율	ω : 진동수 (frequency)
k_B : Boltzmann 상수	
p : 편극 (polarization)	하첨자
q : 파수 (wave number) 또는 열유속	0 : 낮은 진동수 ($q \rightarrow 0$)에서의 값
r : 공간좌표	g : group
T : 온도	L : 종파 (longitudinal wave)
t : 시간	m : Brillouin 영역 경계
v : 속도	ϕ : phase
	s : 산란 (scattering)
	T : 횡파 (transverse wave)
	ω : 진동수 (frequency)

* 회원, 세종대학교 기계공학과
 E-mail : jdchung@sejong.ac.kr
 TEL : (02)3408-3776 FAX : (02)3408-3333

1. 서 론

MEMS/NEMS 공정의 개발과 설계에 있어서 미세 구조의 물성을 정확히 추산, 측정하는 기술은 필수적이다. 특히 고밀도 미세 구조 내에서 발생하는 열 에너지의 이해와 제어가 더욱 중요해지는 추세이다. 하지만 대부분의 마이크로/나노 스케일에서의 실험적 접근은 그 자체가 불가능하거나 매우 비싼 해석이므로 이론적인 방법으로 열 물성을 추산할 필요가 대두된다. 전형적인 이론적 접근방법으로 Boltzmann 수송방정식, Monte Carlo법, 분자동역학 시뮬레이션 (Molecular Dynamic Simulation) 등을 이용하여 마이크로 스케일 전달현상을 해석하면 미세 구조의 물성을 이론적으로 추산하는 것이 가능하다. 하지만 많은 경우 미세구조 내에서 각 운반자, 즉 전자, 광자 (photon), 포논 (phonon)들의 거동 및 상호작용이 알려져 있지 않은 것이 현실이다. 본 연구는 Boltzmann 수송방정식에 기초한 이론적 해석으로 열전도율을 예측하는데 있어서 분산관계 (dispersion relation)가 미치는 영향을 해석하는 것을 목표로 한다.

2. Boltzmann 수송방정식

전자, 포논, 분자, 광자 등의 입자의 통계적인 거동을 보여주는 Boltzmann 수송방정식 (Boltzmann Transport Equation, BTE)은 다음과 같은 식으로 잘 알려져 있다.⁽¹⁾

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + a \cdot \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s \quad (1)$$

여기서 f 는 분포함수이며 우변은 충돌이나 산란에 기인한 산란항 (scattering term)이다. 엄밀한 해석을 위해서는 우변을 운동량 p' 에서 p 로의 산란을 $W(p, p')$ 로 다음과 같이 표현할 수 있으나 산란을 W 는 비선형이며 이로 인해 Boltzmann 수송방정식을 다루는 것이 매우 어렵게 된다.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s = \sum_{p'} [W(p, p')f(p') - W(p', p)f(p)] \quad (2)$$

따라서 많은 경우 완화시간 (relaxation time) 근사에 의해 산란항을 다음과 같이 단순화하여 해석하고 있다.^(2,3)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s = \frac{f_0 - f}{\tau(r, p)} \quad (3)$$

여기서 f_0 는 평형상태의 분포함수이며 $\tau(r, p)$ 는 완화시간이다. 완화시간을 평가하는 것은 쉽지 않은 일로서 연구자마다 다양한 함수형태를 제안하기도 한다. 이는 완화시간에 의한 해석의 불확실성과 오차의 원인이기도 하다. 따라서 Hamilton과 Parrott⁽⁴⁾은 완화시간 근사를 사용하지 않는 해석을 시도하기도 하였고 최근에도 Omini와 Sparavigna⁽⁵⁾이 완화시간 근사의 한계점을 지적한 바 있다. 비록 완화시간 근사에 의해 식 (1)의 우변을 단순화하여도 직접적으로 Boltzmann 수송방정식을 다루는 것은 많은 노력이 필요하다.

전형적인 해석방법은 간략화된 모델에 근거한 해석적인 접근방법과 수치적 접근방법으로 대별된다. 해석적인 접근방법은 Callaway⁽²⁾와 Klemens⁽⁶⁾의 선구적인 연구와 그 후 많은 연구자들에 의해 보다 정교한 모델들이 제시되어 왔다. Holland⁽³⁾는 transverse acoustic (TA) 포논과 longitudinal acoustic (LA) 포논의 역할을 구분함으로써 부분적으로 포논 분산관계를 고려한 모델을 제시하여 Callaway 모델이 낮은 온도에서만 의미를 갖는다는 단점을 극복하고 넓은 온도 범위에서 타당한 모델을 제시하였다. Parrott⁽⁷⁾과 Bhandari와 Rowe⁽⁸⁾는 Callaway 모델의 수정항을 고려한 해석을 하였고 Tawari와 Agrawal⁽⁹⁾은 포논 군속도 (group velocity)와 위상속도 (phase velocity)를 구별함으로써 포논 분산관계의 영향을 보다 정교하게 해석하였다. 그 후 Sood와 Roy⁽¹⁰⁾는 포논분산에 대한 엄밀한 해석과 각 영역에서의 완화시간을 별도로 고려하여 일반적으로 받아들여졌던 사실인 높은 온도에서 주도적인 열전달 메커니즘이 TA 포논이라는 주장이 잘못되었음을 정량적으로 보였다.

3. 분산관계

반도체에서 주도적인 열전달은 포논에 의해 이루어진다. 포논은 변위와 파 진행방향이 평행 또

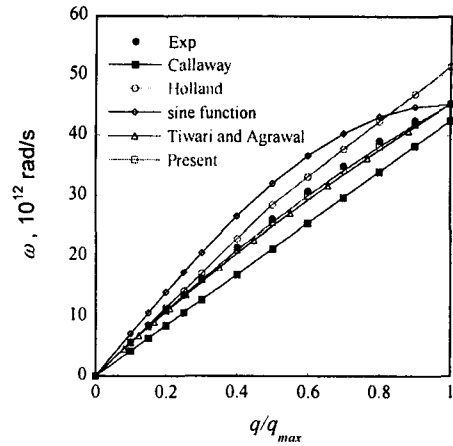
는 수직하는가에 따라 1개의 종파와 2개의 횡파로 구별된다. 각 경우에서 파수(q)와 진동수(ω)의 관계를 분산관계라 한다. 낮은 주파수에서는 흔히 Debye 모델이라 불리는 다음의 선형적인 관계식이 사용된다.

$$\omega = v_g q \tag{4}$$

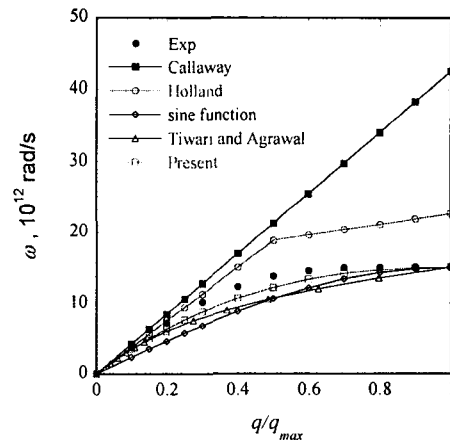
여기서 v_g 는 군속도로 포논의 전달속도, 즉 에너지 전달속도이다. 이러한 유한한 열전달 속도는 열전달 속도가 무한하다고 가정된 Fourier 방정식이 매우 작은 크기영역과 시간영역에서는 타당하지 않은 근거이기도 하다. 위의 선형적인 관계는 높은 진동수, 즉 Brillouin영역 경계부근에서 심하게 왜곡된다. 중성자산란 (Neutron scattering) 방법에 의해 측정된 [100] 방향의 분산관계를 Fig. 1에 나타내었다. 여기서 기호는 실험을 제외하고는 단지 구분만을 위한 목적으로 사용되었다. 방향에 따라 분산관계가 다소 달라지지만 그 특성이 크게 변하지 않고 실험이 가지는 불확실성, 해석의 어려움 등으로 해서 등방성으로 가정하여 해석하기로 한다. TA 포논과 LA 포논 각각에 있어서 germanium에 대한 실험값⁽¹¹⁾과 더불어 본 논문에서 고려하고자 하는 분산관계에 대한 몇 가지 단순화된 모델을 함께 제시하였다. 이러한 단순화 정도가 해석결과에 얼마나 민감하게 영향을 미치는지 살펴보고자 한다. 편극 (polarization)에 따라 각각의 분산모델에서의 군속도를 Fig. 2에 제시하였다. Brillouin영역 경계에서 TA 포논의 군속도는 0에 접근한다는 사실에 주의하여야 한다. 또한 군속도 $v_g = d\omega/dq$ 는 위상속도 $v_p = \omega/q$ 와 구별되어야 하며 이러한 차이가 가지는 영향을 또한 살펴볼 것이다. 본 논문에서는 일반적으로 광학포논 (optical phonon)이 열전달에 미치는 영향은 매우 작은 것으로 알려져 있어 단지 소리포논 (acoustic phonon)만을 해석 대상으로 한다. 하지만 이러한 가정이 고온 영역에서 잘못된 결과를 보일 수도 있다는 것을 제시하였다. 고려하고자 하는 분산관계 모델은 다음과 같다.

(1) Debye 모델: Callaway

$$\omega = v_{0g} q \tag{5}$$



(a)



(b)

Fig. 1 Dispersion relation of germanium for (a) longitudinal acoustic phonons and (b) transverse acoustic phonons

이 모델은 대개 낮은 주파수 영역대에서 유효한 모델로 뒤 서술에서 Callaway 모델에 적용된다. 이 경우 TA 포논과 LA 포논을 구별하지 않으므로 다음 식에 의해 평균화된 포논 군속도를 구한다. 여기서 하첨자 0은 낮은 진동수의 극한, 즉 $q \rightarrow 0$ 에서의 값을 의미한다.

$$\frac{1}{v_{0g}} = 3 \left(\frac{1}{v_{0g,L}} + \frac{2}{v_{0g,T}} \right) \tag{6}$$

다른 모델과의 일관성을 위해 실험⁽¹⁾에서의 값 ($v_{0g,T}=3390.6$, $v_{0g,L}=5142.4$)을 사용하였으며 이 때의 $v_{g0}=3824.9$ 는 Callaway⁽²⁾의 값 $v_{g0}=3500$ 과는 다소 차이가 있다.

(2) TA 포논과 LA 포논으로 구별된 2 영역 Debye 모델: Holland

$$\omega_p = v_{p,g}q \quad (7)$$

이 모델은 Holland⁽³⁾의 해석에서 사용된 분산관계이다. $q/q_{max} \sim 0.5$ 를 경계로 2 영역으로 나누어 각 영역에서는 일정하지만 높은 주파수영역에서는 다소 낮은 군속도를 가진다. 하지만 이러한 영역 구분의 경계는 매우 임의적이며 어떠한 물리적 근거도 발견할 수 없다. 또한 Umklapp 산란이 이 경계를 시작으로 갑자기 의미를 갖는다는 사실도 매우 인위적이다. 여기서도 다른 모델과의 일관성을 위해 $v_{p,g}$ 의 값이 Holland⁽³⁾의 해석과는 다소 차이가 있음에 주의할 필요가 있다.

(3) Sine 함수

이 모델은 선형 원자사슬에 대한 근사식이다.

$$\omega_p = w_{mp} \sin\left(\frac{q}{q_m} \frac{\pi}{2}\right) \quad (8)$$

상기 두 모델과는 달리 여기서는 군속도가 파수에 따라 다음과 같이 변하게 된다.

$$v_{g,p} = \frac{d\omega}{dq} = \frac{\omega_{mp}}{q_m} \frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{q}{q_m} \frac{\pi}{2}\right) \quad (9)$$

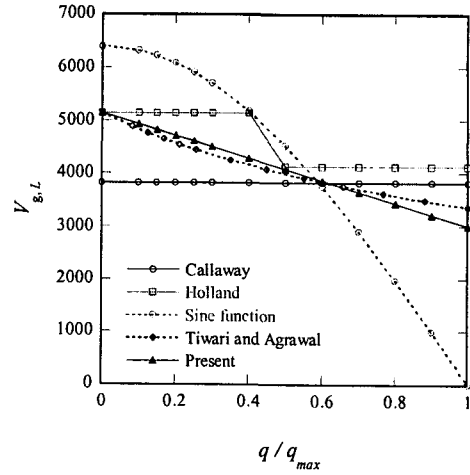
여기서 $q_m = 2\pi/a$ 은 첫 번째 Brillouin영역 경계에 대응한다. 이 모델의 심각한 단점은 낮은 주파수 영역에서 비현실적인 거동을 보인다는 것이다. 이는 $v_{0g,L}$ 와 $v_{0g,T}$ 의 값이 실험값과 다르기 때문이다.

(4) Tiwari and Agrawal 모델

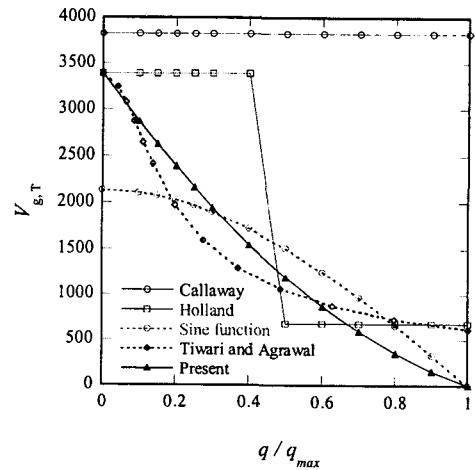
$$q_L = \omega_L v_L^{-1} (1 + \alpha \omega_L)$$

$$q_T = \omega_T v_T^{-1} (1 + \beta \omega_T^2) \quad (10)$$

여기서 n 을 단위부피 당 살창점 (lattice point)의 수



(a)



(b)

Fig. 2 Group velocity of germanium for (a) longitudinal phonon and (b) transverse phonon

로 하면 다음과 같이 α , β 를 결정할 수 있다.

$$\alpha = (1/\omega_{mL}) [(6n\pi^2)^{1/3} v_L / \omega_{mL} - 1]$$

$$\beta = (1/\omega_{mT}^2) [(6n\pi^2)^{1/3} v_T / \omega_{mT} - 1] \quad (11)$$

이렇게 결정된 값은 Brillouin영역 경계에서의 ω_{mL} 와 ω_{mT} 의 실험값 ($\omega_{mT} = 2\pi \times 2.4 \times 10^{12}$,

$w_{mL} = 2\pi \times 7.21 \times 10^{12}$)으로 얻은 결과와 거의 일치한다. ($\alpha = 5.786 \times 10^{-15}$, $\beta = 6.596 \times 10^{-27}$)

(5) Present

$$\omega_L = v_{0L}q + \frac{\omega_{mL} - v_{0L}q_m}{q_m^2} q^2,$$

$$\omega_T = v_{0T}q + (3\omega_{mT} - 2v_{0T}q_m) \left(\frac{q}{q_m}\right)^2 + (v_{0T}q_m - 2\omega_{mT}) \left(\frac{q}{q_m}\right)^3 \quad (12)$$

LA 포논에 대해서는 2차식, TA 포논에 대해서는 3차식으로 근사하여 아래 경계조건을 사용하여 실험값에 근사시킨다. 단, 식 (13d)는 TA 포논에 대해서만 적용한다.

$$(a) \quad v = v_{0p} = \frac{d\omega}{dq} \text{ at } q \rightarrow 0 \quad (13a)$$

$$(b) \quad w = w_{mp} \text{ at } q = q_m \quad (13b)$$

$$(c) \quad \omega = 0 \text{ at } q \rightarrow 0 \quad (13c)$$

$$(d) \quad v_T = 0 \text{ at } q = q_m \quad (13d)$$

4. 열전도율

4.1 일반화된 모델

식 (1)로 표현된 Boltzmann 수송방정식은 외력이 없는, 일차원, 정상상태로 가정하고 완화시간 근사와 평형상태라는 조건에서 다음 식으로 선형화된다.

$$v_x \frac{df_{0\omega}}{dT} \frac{dT}{dx} = \frac{f_{0\omega} - f_\omega}{\tau} \quad (14)$$

여기서 구한 포논 분포함수, f_ω 과 열유속의 정의 $q_x = \int v_x f_\omega \hbar \omega D(\omega) d\omega$ 로부터 열전도율을 구할 수 있다. 여기서 포논은 Bose-Einstein 분포, 즉 $f_{0\omega} = \{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1\}^{-1}$ 를 따르며 $D(\omega)$ 는 상태밀도 (density of state)이다. 따라서 편극과 분산이 고려된 일반적인 열전도율은 다음과 같다.

$$k = \frac{1}{3} k_L + \frac{2}{3} k_T \quad (15)$$

$$k = \frac{k_B}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \tau \frac{v_g}{v_p^2} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (16)$$

여기서 $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ 이다.

4.2 Callaway 모델

Callaway 모델은 낮은 온도에서만 유효한 모델로 편극과 분산이 고려되지 않고 모든 주파수에서 일정한 열전달 속도를 가정한다. 이러한 가정에서 열전도율은 다음 식으로 표현된다.

$$k = \frac{k_B}{2\pi^2 v} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \tau x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (17)$$

여기서 완화시간은 불순물산란 (impurity scattering), 정상 3-포논 산란 (Normal 3-phonon scattering), Umklapp 산란, 경계산란 (boundary scattering)으로 구성되며 다음 식으로 표현된다.

$$\tau^{-1} = A(k_B/\hbar)^4 x^4 T^4 + (B_1 + B_2)(k_B/\hbar)^2 x^2 T^5 + v/L \quad (18)$$

여기서 $A, B_1 + B_2, L$ 은 실험값에 근사하여 얻어진다.

4.3 Holland 모델

Holland 모델은 넓은 온도 범위에서 유효한 모델로 LA 포논과 TA 포논으로 구분하여 각 영향을 해석하였으며 포논 속도를 일정하다고 가정하였으나 두 영역으로 나누어 다른 속도를 사용함으로써 부분적으로 분산을 고려하였다. 모델에서 사용된 열전도율과 각 영역에서의 완화시간은 다음과 같다.

$$k = k_{T0} + k_{TU} + k_L \quad (19)$$

$$k_{T0} = \frac{2}{3} \frac{k_B}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{\tau_{T0}}{v_{g,T}} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

$$\tau_{T0}^{-1} = \alpha x^4 T^4 + \beta_T x T^5 + v_{g,T}/LF \quad (20)$$

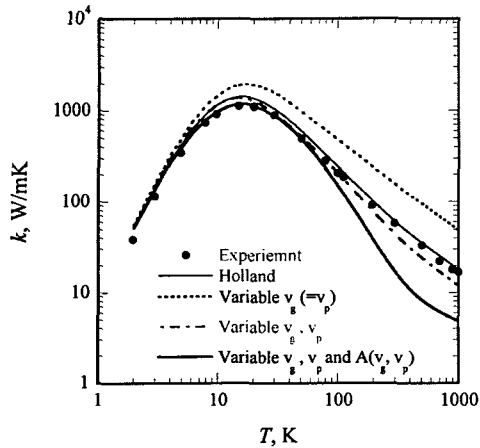


Fig. 3 Effect of the difference between group velocity and phase velocity on the analysis of the thermal conductivity of germanium

$$k_{TU} = \frac{2}{3} \frac{k_B}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_{\theta_1/T}^{\theta_2/T} \frac{\tau_{TU}}{v_{g,T}} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

$$\tau_{TU}^{-1} = \alpha x^4 T^4 + \beta_{TU} x^2 T^2 / \sinh x + v_{g,T} / LF \quad (21)$$

$$k_L = \frac{1}{3} \frac{k_B}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\theta_3/T} \frac{\tau_L}{v_{g,L}} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

$$\tau_L^{-1} = \alpha x^4 T^4 + \beta_L x^2 T^6 + v_{g,L} / LF \quad (22)$$

여기서 θ_1 은 Umklapp 산란이 시작되는 주파수에 대응한다. 하지만 Umklapp 산란이 θ_1 에서 갑자기 의미를 갖는다는 사실은 매우 인위적이다.

5. 분산관계가 열전도율에 미치는 영향

Fig. 3과 Fig. 4는 온도에 따라 열전도율을 실험값⁽²⁾과 함께 각 모델의 결과를 보여준다. 동일한 완화시간에 대해서도 분산모델에 따라 매우 큰 차이가 발견된다. 보다 실험값에 가까운 분산모델을 사용하고, 보다 정교한 열전달 모델, 즉 v_g 와 v_p 의 차이가 고려된 모델의 경우에 매우 낮은 열전도율이 예측된다. 물론 이것이 실험값에 가까운 Holland 모델이 보다 우수한 모델임을 의미

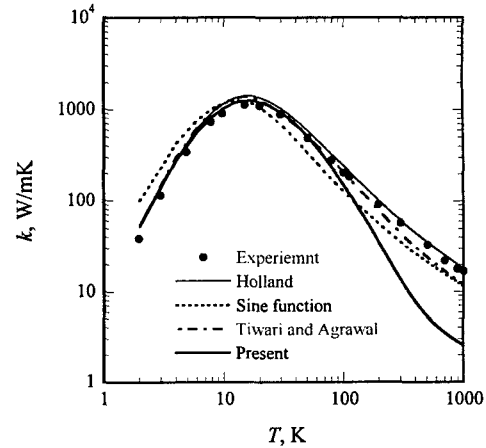


Fig. 4 Effect of phonon dispersion model on the analysis of the thermal conductivity of germanium

하지는 않는다. 왜냐하면 Holland 모델은 이미 실험값에 가깝도록 조절된 완화시간의 상수 ($\beta_T, \beta_{TU}, \beta_L, L$)를 사용하였고 다른 모델들은 일관성을 위해 Holland 모델에서 얻어진 완화시간의 상수를 동일하게 사용하였기 때문이다. 동일한 조건에서 분산모델의 영향과 v_g 와 v_p 의 차이가 미치는 영향을 살펴보기 위함이다. 다른 모델에 대해서도 실험값에 근사된 완화시간 상수를 사용할 경우 실험에 훨씬 근접한 결과를 얻을 수 있다. 이러한 근사가 필요하다는 사실과 이와 관련된 불확실성이 해석적 접근방법의 심각한 단점이다.

Fig. 3에서 「Variable $v_g (=v_p)$ 」는 포논 속도가 일정한 Holland 모델에 비해 포논 속도가 분산관계를 따라 변하지만 군속도와 위상속도를 구별하지는 않은 경우이며, 「Variable v_g, v_p 」는 분산관계에 따라 군속도와 위상속도가 결정되는 모델이다. Fig. 3과 Fig. 4에서 보이는 정교한 열전달 모델과 분산모델이 Holland 모델에 비해 특히 높은 온도에서 낮은 열전도율을 예측함은 Holland 모델에서 산란이 과소 예측했음을 알 수 있다. 높은 온도에서 주도적인 열전달 모드가 Umklapp 산란에 의한 TA 포논임을 생각하면 이러한 과소평가는 높은 온도영역에서 TA 포논의 역할을 과대평가했음을 의미한다. Holland 모델에

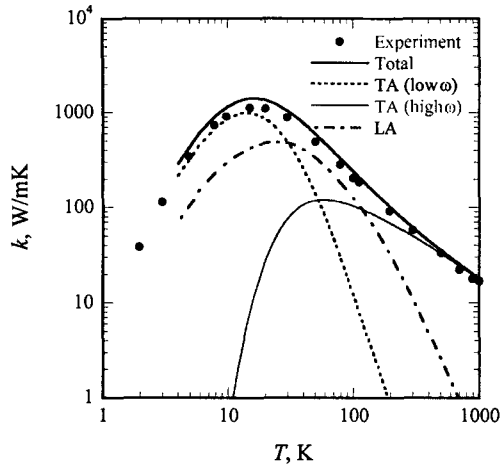


Fig. 5 Contribution of TA and LA phonons on the thermal conductivity of germanium based on Holland model

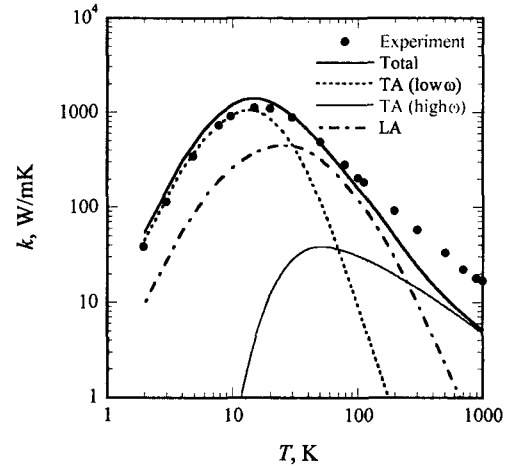


Fig. 6 Contribution of TA and LA phonons on the thermal conductivity of germanium based on present model

근거한 모든 연구들이 높은 온도에서 주도적인 열전달 모드로 TA 포논의 역할을 주장하는 것은 이러한 점에서 재고찰이 필요할 것이다. 이를 확인하기 위해 Fig. 5와 Fig. 6은 전체 열전도율과 낮은 주파수영역에서의 TA 포논, 높은 주파수영역에서의 TA 포논, 그리고 LA 포논의 열전도율에 미치는 영향을 함께 보여준다. 알려진 바와 같이 Holland 모델은 고온에서 주도적인 열전달 모드는 높은 주파수에서의 TA 포논임을 재확인할 수 있다. 하지만 보다 엄밀한 해석에 의하면 Fig. 6에서 보이듯이 TA 포논과 LA 포논이 비슷한 정도의 영향을 미치고 있다. 이는 완화시간 상수 ($\beta_T, \beta_{TU}, \beta_L, L$)를 실험값에 근사한 후에도 동일한 결과를 보여준다. 완화시간 상수를 실험값에 근사한 후의 결과에서 주목할 사실은 Umklapp 산란만으로는 실험값에 근사한 정도가 만족스런 수준이 아니라는 사실이다. 이럴 경우 높은 온도에서 가장 주도적인 열전달 모드는 높은 주파수에서의 TA 포논이라는 기존의 주장은 의미를 잃게 된다.

따라서 높은 온도에서 주도적인 열전달 모드는 높은 주파수에서의 TA 포논이라는 기존의 주장과는 달리 새로운 열전달 모드의 역할이 필요하다. 가능성 있는 하나는 Holland 모델에서는 무시된 높은 주파수영역에서 Umklapp 산란에 의한

LA 포논의 역할이다. 또 다른 하나는 기존에 무시되었던 광학포논의 역할이 높은 온도영역에서는 의미를 가질 수 있다는 사실이다. 이는 McGaughey와 Kaviany⁽¹²⁾에서 주장되었듯이 광학포논은 절대값은 작지만 온도에 상관없이 일정하게 열전달에 영향을 미치기 때문이다. 따라서 낮은 온도 영역, 즉 열전도율이 클 경우는 상대적으로 광학포논의 역할이 무시될 수 있지만 높은 온도영역, 즉 열전도율이 작을 경우 그 영향은 무시될 수 없게 된다.

6. 완화시간 모델

완화시간은 열전도율을 결정하는 데 있어 매우 중요함에도 불구하고 이에 대한 엄밀한 합의는 존재하지 않는다. 이는 완화시간이 편극에 따라 온도와 주파수의 함수이기에 넓은 온도범위와 주파수 범위에 대해 유일한 함수형태를 가정하기 어렵기 때문이다. 물론 몇 개의 구간으로 나누어진 온도범위와 주파수 범위로 나누어서 각 구간마다 다른 형태의 함수 형태를 가정하기도 하지만 각 구간에서 사용된 완화시간의 엄밀성은 확인된 바 없다. 때문에 연구자에 따라 동일한 대상에 대해 서로 다른 완화시간을 사용하기도 한다. 본 연구에서는 열전도율에 미치는 분산관계

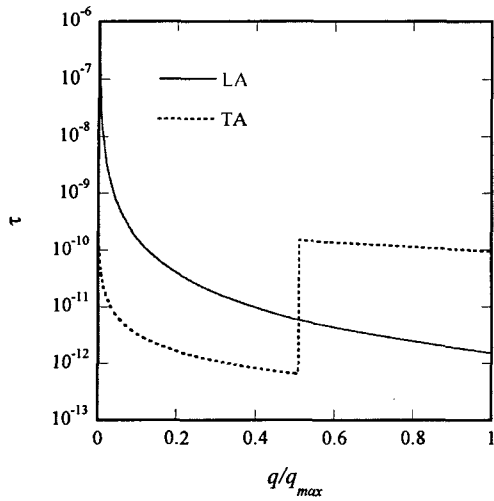
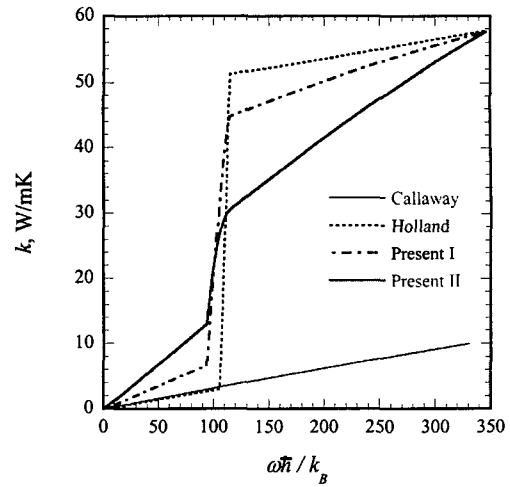


Fig. 7 The behavior of relaxation time according to wavenumber

의 영향과 v_g 와 v_p 의 구별이 미치는 영향을 살펴보는 것을 목표로 하며 완화시간과 관련된 불확실성은 논외로 한다. 따라서 모든 경우에서 Holland 모델에서 사용된 완화시간을 사용하였으며 단지 여기서 사용된 완화시간이 가지는 문제점만을 다음에 서술한다.

Fig. 7은 $T = 300\text{K}$ 에서 파수에 따른 완화시간을 TA 포논과 LA 포논으로 구별하여 보여준다. $q/q_{\text{max}} \sim 0.5$ 에서 매우 급격한 변화가 있다는 것은 물리적으로 납득하기 어려운 점이며 Holland 모델에서는 이에 대한 특별한 주의를 기울이지 않고 있다. 이러한 완화시간의 급격한 변화는 $q/q_{\text{max}} \sim 0.5$ 를 경계로 Umklapp 산란이 의미를 갖는 것으로 모델링되어 있기 때문이다. 하지만 Umklapp 산란이 이 경계를 시작으로 갑자기 의미를 갖는다는 사실은 매우 인위적이다.

Fig. 8은 $T = 300\text{K}$ 와 $T = 75\text{K}$ 에서 주파수에 따라 적분된 열전도율을 보여준다. $T = 300\text{K}$ 에서 매우 좁은 주파수 영역에서 열전도율의 급격한 상승이 발견된다. 이 주파수 영역대는 TA 포논의 Umklapp 산란이 의미를 갖게 되는 영역으로 TA 포논이 주도적인 열전달 모드임을 보여준다. 하지만 온도가 상대적으로 더 낮은 $T = 75\text{K}$ 에서는 TA 포논의 역할이 상대적으로 작음을 알 수 있다. 또 하나 관심 있는 사실은 앞에서 서술한 바



(a)

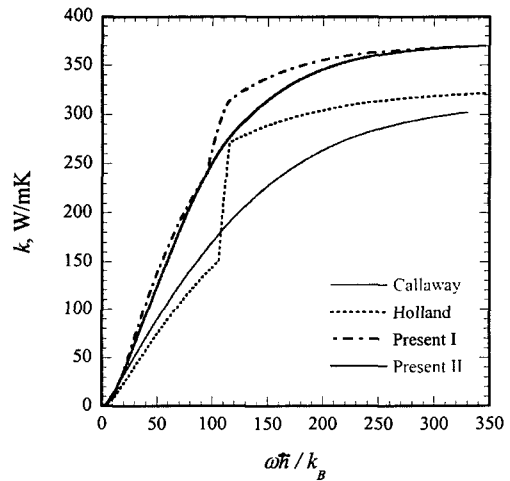


Fig. 8 Thermal conductivity frequency integrals for germanium at (a) $T = 300\text{K}$ and (b) $T = 75\text{K}$

와 같이 Holland 모델의 경우 TA 포논의 Umklapp 산란이 과소평가되어 있으므로 본 논문에서 사용하고 있는 보다 정교한 모델의 경우는 좁은 주파수 영역에서 열전도율의 상승이 상대적으로 완화되어 있음을 확인할 수 있다. 여기서 "Present I"은 본 논문에서 사용한 분산모델에 근거한 v_g 와 v_p 의 구별이 열전달 모델에 고려된 경우이며 "Present II"는 "Present I"에 더불어 v_g

와 v_p 의 구별이 불순물산란에 미치는 영향까지 고려된 경우이다.

7. 결론

(1) 동일한 완화시간 모델 하에서 5가지의 분산 모델을 대상으로 포논 분산이 열전도율의 해석모델에 미치는 영향을 살펴보았다. 포논 분산관계가 열전도율 예측에 큰 영향을 미치며, 본 논문에서 제시한 실험에 가까운 정교한 분산모델을 사용할 경우 높은 온도에서 열전도율이 기존 모델에서 예측하지 못한 결과를 보인다. 이는 기존의 Holland 모델에서는 높은 온도에서 산란이 과소평가되었음을 의미한다.

(2) 군속도와 위상속도의 차이가 열전도율에 미치는 영향은 매우 크며 해석모델에 반드시 고려되어야 할 것이다.

(3) Holland 모델은 높은 온도에서 Umklapp 산란을 과소평가하여 높은 온도에서 주도적인 열전달 모드가 TA 포논이라는 결론을 내렸지만 정교한 열전달 해석모델과 분산이 고려되면 높은 온도에서의 주도적인 열전달 모드는 TA 포논이 아님을 알 수 있다. 높은 주파수에서의 Umklapp 산란에 의한 LA 포논과 광학포논이 가능성 있는 주도적인 열전달 모드이다. 이에 대해서는 추가적인 연구가 필요할 것이다.

후 기

이 논문은 2001년도 한국학술진흥재단의 지원에 의하여 연구되었음 (KRF-2001-003-E00002)

참고문헌

(1) Ziman, J. M., 1960, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, London.
 (2) Callaway, J., 1959, "Model of Lattice Thermal

Conductivity at Low Temperatures," *Phys. Rev.*, Vol. 113, pp. 1046~1051.
 (3) Holland, M. G., 1963, "Analysis of Lattice Thermal Conductivity," *Phys. Rev.*, Vol. 132, pp. 2461~2471.
 (4) Hamilton, R. A. and Parrott, J. E., 1969, "Variational Calculation of the Thermal Conductivity of Germanium," *Physical Review*, Vol. 178, pp. 1284~1292.
 (5) Omini, M. and Sparavigna, A., 1995, "An Iterative Approach to the Phonon Boltzmann Equation in the Theory of Thermal Conductivity," *Physica B*, Vol. 212, pp. 101~112.
 (6) Klemens, P. G., 1958, *Solid State Physics*, Academic Press Inc., New York.
 (7) Parrott, J. E., 1971, "Generalization of the Callaway Thermal Conductivity Equation," *Phys. Status Solidi B*, Vol. 48, pp. K159~K161
 (8) Bhandari, C. M. and Rowe, D., 1979, "The Generalisation of the Callaway Thermal Conductivity Equation," *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 12, pp. L883~L885.
 (9) Tiwari, M. D. and Agrawal, B. K., 1971, "Analysis of the Lattice Thermal Conductivity of Germanium," *Physical Review B*, Vol. 4, pp. 3527~3532.
 (10) Sood, K. C. and Roy, M., 1993, "Longitudinal Phonons and High-Temperature Heat Conduction in Germanium," *J. Phys: Condens. Matter*, Vol. 5, pp. 301~312.
 (11) Nilsson, G. and Nelin, G., 1971, "Phonon Dispersion Relations in Ge at 80K," *Physical Review B*, Vol. 3, pp. 364~369.
 (12) McGaughey, A. J. H. and Kaviany, M., "Thermal Conductivity Decomposition and Analysis Using Molecular Dynamics Simulations. Part II. Complex Silica Structures," *submitted to International Journal of Heat and Mass Transfer*.