Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Кулеев Иван Игоревич

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ, ЭЛЕКТРОННЫЙ И ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В УПРУГО АНИЗОТРОПНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ И НАНОСТРУКТУРАХ НА ИХ ОСНОВЕ

1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Екатеринбург – 2025

оглавление

ВВЕДЕНИЕ	5
1 Распространение упругих волн и фокусировка фононов в кубических кристаллах	15
1.1 Динамические характеристики фононов металлических и диэлектрических	
кристаллов в модели анизотропного континуума	17
1.2 Групповая скорость и особенности распространения фононов в металлических и	
диэлектрических кристаллах кубической симметрии	31
1.3 Влияние фокусировки на плотность фононных состояний в щелочных металлах	37
1.4 Коэффициент усиления потока фононов в металлических и диэлектрических	
кристаллах кубической симметрии	44
1.5 Анализ угловых зависимостей коэффициента усиления	47
1.6 Выводы	57
2 Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности диэлектрических	
кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии	59
2.1 Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и решеточная теплопроводность	
кубических кристаллов	61
2.2 Фокусировка фононов и решеточная теплопроводность диэлектрических кристаллов	64
2.3 Анализ температурных зависимостей теплопроводности для образцов кремния с	
квадратным и прямоугольным сечениями	68
2.4 Физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности	
кубических кристаллов	74
2.5 Выводы	83
3 Фононный транспорт в наноструктурах на основе диэлектрических и	
полупроводниковых кристаллов и материалов спинтроники	85
3.1 Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в	
монокристаллических нанопроводах из материалов спинтроники.	85
3.2 Влияние фокусировки на длины свободного пробега фононов в пленках	
в режиме кнудсеновского течения фононного газа	94
3.3 Особенности фокусировки фононов и анизотропии теплопроводности	
в квадратных и длинных пленках	98
3.4 Анизотропия теплопроводности в гетероструктурах GaAs/AlGaAs	107
3.5 Выводы	114
4 Фокусировка фононов и электронный транспорт в монокристаллах калия	117
4.1 Электрон-фононная релаксация в упруго анизотропных металлах	122
4.2 Влияние фокусировки фононов на решеточную теплопроводность	

и термоэдс увлечения в кристаллах калия	126
4.3 Роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения и решеточной теплопроводности	
объёмных кристаллов калия	131
4.4 Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и	
электросопротивления кристаллов калия	137
4.5 Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов и	
электросопротивление кристаллов калия	145
4.6 Выводы	157
5 Влияние фокусировки фононов и сдвиговых волн на термоэдс увлечения в	
монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах	159
5.1 Влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения	
в нанопроводах на основе кристаллов калия	161
5.2 Анизотропии термоэдс увлечения в нанопроводах в условиях конкуренции	
граничного и объёмных механизмов релаксации фононов	166
5.3 Термоэдс увлечения в монокристаллических нанопластинах калия при низких	
температурах	169
5.4 Анизотропия термоэдс увлечения нанопластин в условиях конкуренции граничного	
и объёмных механизмов релаксации	174
5.5 Фокусировка фононов и термоэдс увлечения в квадратных пленках калия в условиях	
конкуренции граничного и объемных механизмов релаксации	179
5.6 Анизотропия термоэдс увлечения в длинных пленках калия	186
5.7 Выводы	191
6 Влияние анизотропии упругой энергии и сдвиговых волн на электрон-фононную	
релаксацию и электросопротивление благородных металлов	193
6.1 Динамические характеристики и фокусировка фононов в благородных металлах	195
6.2 Электрон-фононная релаксация в благородных металлах	201
6.3 Поверхность ферми в благородных металлах	203
6.4 Влияние анизотропии упругой энергии на электросопротивление благородных	
металлов	205
6.5 Обсуждение результатов	209
6.6 Выводы	216
Заключение	218
Публикации автора	221
Список литературы	225

Приложение А Скорости релаксации фононов при диффузном рассеянии					
на границах монокристаллических образцов конечной длины	240				
А.1 Релаксация фононов на границах образцов бесконечной длины с круглым,					
квадратным и прямоугольным сечениями	240				
А.2 Скорости релаксация фононов при диффузном рассеянии на границах					
образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями	246				
А.3 Анизотропия длин свободного пробега фононов в образцах кремния					
с круглым и квадратным сечениями при низких температурах	251				

введение

Актуальность темы

В настоящее время в теории электронного и фононного транспорта ряд важных теоретических проблем остаются нерешенными. Одной из этих проблем является влияние анизотропии упругой энергии на распространение фононов, их фокусировку и решеточную теплопроводность диэлектрических монокристаллов и наноструктур на их основе, а также на электрон-фононную релаксацию и явления электронного переноса в объёмных металлических образцах и наноструктурах на их основе.

В связи с интенсивным развитием технологии изготовления и широким использованием нанопленок и нанопроводов в микроэлектронике значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств [1-7]. Особенности фононного транспорта в таких структурах обусловлены тем, что длина свободного пробега фононов в широком температурном интервале оказывается больше или сравнима с характерными размерами наноразмерного образца. Поэтому рассеяние фононов на границах играет важную роль в теплосопротивлении наноразмерных материалов в интервале температур от гелиевых до комнатных. В этом случае длина свободного пробега фононов определяется характером взаимодействия фононов с поверхностью. Такую ситуацию, когда доминирующим механизмом релаксации является диффузное рассеяние фононов на границах, принято называть режимом граничного рассеяния фононов. Впервые задачу о теплопроводности тонкого диэлектрического стержня бесконечной длины в модели изотропной среды при диффузном рассеянии фононов на границах образца рассмотрел Казимир [8] в 1938 г. Он нашел, что длина свободного пробега фононов в цилиндрическом стержне бесконечной длины равна его диаметру. В связи с этим длина пробега фононов в образцах бесконечной длины получила название длины Казимира. Полученный результат совпадает с результатом Кнудсена [9], найденном ранее для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Поэтому режим граничного рассеяния фононов получил название кнудсеновского течения фононного газа. Позже Берман с коллегами [10-11] рассмотрели влияние частично зеркального отражения фононов от поверхности образца, а также эффект конечной длины на теплопроводность в режиме граничного рассеяния. Однако аналитических выражений для поправок к теплопроводности из-за конечной длины образца в работах [10-11] найдено не было, и для каждого образца подбирался свой подгоночный параметр, определяющий величину граничного рассеяния.

Анизотропия упругих свойств кристаллов приводит к ряду новых эффектов в фононном транспорте. Одним из таких эффектов является фокусировка фононов. В работах [12-14] показано, что из-за неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в

кристаллической решетке. Следует отметить, что если плотность фононных состояний для всех направлениий в изотропных средах имеет одинаковое значение, то в упруго анизотропных кристаллах она становится анизотропной: в направлениях фокусировки фононов она может быть значительно больше, чем средние значения в изотропных средах, тогда как в направлениях дефокусировки оно может быть значительно меньше его. Поэтому фокусировка фононов может оказать существенное влияние не только на фононный транспорт, но и на электрон-фононную релаксацию и явления электронного переноса в металлах.

Экспериментальные исследования МакКарди и др. [15] показали, что фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния. Первым эффектом является зависимость теплопроводности от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей: для образцов Si с квадратным сечением величина теплопроводности при низких температурах в направлении [001] оказалась на 40% и 50% больше, чем в направлениях [011] и [111]. Для кристаллов CaF₂ наоборот - в направлении [001] теплопроводность оказалась меньше на 40%, чем в направлении [111]. Вторым эффектом является зависимость теплопроводности образцов с прямоугольным сечением при низких температурах от ориентации боковых граней. Для двух исследованных в [15] образцов, имеющих одинаковые геометрические параметры и направление градиента температуры [110], оказалось, что теплопроводность образца с широкой гранью {001} и узкой $\{110\}$ на 33% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$ и узкой $\{001\}$. При температурах выше максимума теплопроводности к(*T*) длина свободного пробега фононов становится изотропной – она не зависит от направления потока тепла в кристалле.

В работе [15] теория Казимира была обобщена на случай упруго анизотропных кристаллов. Авторам удалось рассчитать длины свободного пробега фононов в образцах Si и CaF₂ в режиме кнудсеновского течения фононного газа для симметричных направлений при температуре 3 К. Получить аналитические выражения для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины и рассчитать температурные зависимости теплопроводности образцов Si и CaF₂ авторам [15] не удалось. Поэтому за сорок лет со времени этой публикации не было выполнено ни одной работы, в которой бы анализировали температурные зависимости теплопроводности упруго анизотропных диэлектрических образцов и наноструктур на их основе с учетом фокусировки фононов. Эта задача была одной из проблем, которую решали в настоящей работе. Результаты этих исследований подведены в монографии [A26, A27].

Теория явлений электронного переноса в металлах основывается на работах Пайерлса, Блоха, Грюнайзена [16-19]. В этих работах, как и в последующем развитии теории в монографиях Вильсона, Займана и Блатта [20-23] для фононов использована модель изотропной среды. В этой модели только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами через потенциал деформации и давать вклад в электросопротивление металлов. В отличие от изотропных сред в щелочных и благородных металлах (БМ), имеющих кубическую симметрию, распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, которые имеют отличную от нуля продольную компоненту [24-27]. Поэтому в рамках стандартной теории потенциала деформации [20-23] они могут взаимодействовать с электронами. Однако при расчетах электросопротивления металлов роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн и не учитывали. Не рассматривали также эффекты, обусловленные анизотропией фононного спектра в металлах на электронфононную релаксацию и термоэлектрические явления в металлических монокристаллах и наноструктурах на их основе. Эти две проблемы явились движущим мотивом настоящей работы. Результаты этих исследований подведены в монографии [А27].

Цель диссертационной работы:

Построить теорию электронного и фононного транспорта в упруго анизотропных металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе, учитывающую эффект фокусировки фононов.

Задачи исследования:

1. Проанализировать влияние фокусировки на распространение упругих волн и плотность фононных состояний в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии.

2. Рассчитать анизотропию и температурные зависимости теплопроводности образцов кремния и CaF₂ с квадратным и прямоугольным сечениями и дать физическую интерпретацию эффектов МакКарди. Проанализировать эти эффекты для других полупроводниковых кристаллов. Изучить влияние фокусировки фононов на решеточную теплопроводность в кубических кристаллах.

3. Исследовать фононный транспорт в полупроводниковых и диэлектрических наноструктурах с различным типом упругой анизотропии, а также в гетероструктурах GaAs/AlGaAs при низких температурах.

4. Определить константу связи электронов со сдвиговыми волнами *E*_{0t} из сопоставления рассчитанных зависимостей решеточной теплопроводности и термоэдс увлечения с экспериментальными данными в кристаллах калия. Проанализировать роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения и электросопротивлении кристаллов калия.

5. Изучить влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в монокристаллических нанопроводах, нанопластинах и нанопленках на основе кристаллов калия при низких температурах.

6. Разработать метод определения константы связи электронов со сдвиговыми волнами *E*_{0t} в благородных металлах и исследовать влияние анизотропии упругой энергии и сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление благородных металлов.

<u>Научная новизна работы</u> в диссертационной работе развито новое направление исследований влияния анизотропии упругой энергии на фокусировку фононов, электронный и фононной транспорт в металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе.

Во-первых, проанализирована фокусировка фононов и её влияние на распространение упругих волн в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. Рассчитаны скорости релаксации фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Дано физическое объяснение эффектов МакКарди в теплопроводности образцов кремния, а также других диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии. Рассчитана и объяснена анизотропия теплопроводности нанопроводов и нанопленок на основе диэлектрических кристаллов, а также материалов спинтроники.

Во-вторых, исследовано влияние упругой анизотропии и фокусировки фононов на электронный транспорт в монокристаллах калия и благородных металлов. Это позволило проанализировать роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн в этих эффектах. Показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D$, квазипоперечные фононы, которые ранее не учитывали [16-23], вносят доминирующий вклад в электрон-фононную релаксацию: их вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление калия составил 92%, тогда как для электросопротивления благородных металлов он превышает 97%. Учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных фононах позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К без использования подгоночных параметров.

Положения, выносимые на защиту:

1. Все кристаллы кубической симметрии в соответствии со знаком безразмерного параметра анизотропии k-1 ($k = (c_{12} + c_{44})/(c_{11} - c_{44})$, где c_{ij} - модули упругости кубического кристалла), могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной k-1>0 (тип I) и отрицательной k-1<0 (тип II) анизотропией упругих свойств. Направления фокусировки и дефокусировки фононов в кристаллах одного типа совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны.

2. Дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии в условиях кнудсеновского течения фононного газа.

А. Первый эффект МакКарди заключается в реализации максимальных и минимальных значений теплопроводности в монокристаллических образцах конечной длины с квадратным сечением в зависимости от направления теплового потока. Показано, что первый эффект МакКарди обусловлен фокусировкой *медленной поперечной моды* в кристаллах обоих типов. Причем, в кристаллах первого типа её фокусировка и максимум теплопроводности достигается в направлении [001], а минимум – в направлении [111], тогда как в кристаллах второго типа наоборот: фокусировка медленной моды и максимум теплопроводности достигается в направлении [111], а минимум – в направлении [001].

Б. Второй эффект МакКарди заключается в реализации максимальных и минимальных значений теплопроводности в монокристаллических образцах конечной длины с прямоугольным сечением для теплового потока в направлении [011] в зависимости от ориентации широких граней образцов {001} или {011}. Этот эффект обусловлен *фокусировкой быстрой поперечной моды в кристаллах обоих типов*, приводящей к изменению распределения теплового потока по поперечному сечению образца. При этом, в кристаллах первого типа теплопроводность для образцов с широкой гранью {001} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {110}. Однако в кристаллах второго типа – наоборот: теплопроводность для образцов с широкой гранью {011} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {001}.

3. Температурные зависимости термоэдс увлечения, решеточной теплопроводности кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций, рассчитанные в рамках феноменологического метода при учете влияния сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и термоэдс увлечения в металлах, хорошо согласуются с экспериментальными данными, что позволило определить константу связи E_{0t} электронов со сдвиговыми волнами и рассчитать электросопротивление кристаллов калия в рамках теории Блоха-Грюнайзена. Квазипоперечные фононы, которые ранее не учитывали, вносят преобладающие вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия.

4. Для наноструктур с поперечными размерами $D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа, а термоэдс увлечения $\alpha_{drag}(T)$ и решеточная теплопроводность $\kappa(T)$ становятся анизотропными и следуют зависимостям: $\alpha_{drag} \approx B_2 T^4$ и $\kappa(T) \approx CT^3$. Для поперечных размеров $D > \cdot 10^{-2}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации фононов: термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность становятся изотропными и

следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \approx AT^3$ и $\kappa(T) \approx BT^2$. В режиме кнудсеновского течения фононного газа угловые зависимости термоэдс увлечения в наноструктурах и длины свободного пробега фононов для всех поляризаций качественно согласуются.

5. Метод расчета температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов, основанный на включении в электрон-фононную релаксацию рассеяние электронов на сдвиговых волнах, обеспечивает хорошее согласие результатов расчета электросопротивления для всех БМ с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К. Релаксация электронов на сдвиговых волнах, которую ранее не учитывали, вносит доминирующий вклад в удельное электросопротивление благородных металлов в диапазоне температур от 10 до 1000 К. При температурах значительно ниже температуры Дебая этот вклад составляет 95, 91 и 95 % удельного электросопротивления для кристаллов Au, Ag и Cu, соответственно, а при T = 1000 К их вклады составляют 73, 44 и 66 %.

Научная и практическая значимость работы заключается в следующем:

1. Анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах показал, что в соответствии со знаком безразмерного параметра анизотропии k-1 все кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной k-1>0 (тип I) и отрицательной k-1<0 (тип II) анизотропией упругой энергии. Такое разделение значительно облегчает анализ влияния упругой анизотропии на плотность фононных состояний и фононный транспорт в диэлектрических кристаллах.

2. Разработан метод расчета теплопроводности упруго анизотропных монокристаллических образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением, учитывающий фокусировку фононов. Показано, что в образцах с круглым и квадратным сечением коэффициент теплопроводности зависит от одного ориентационного параметра – направления теплового потока относительно кристаллографических осей. В образцах с прямоугольным сечением или пленках он зависит уже от двух ориентационных параметров: от направления теплового потока и ориентации широкой грани образца или плоскости пленки. Практическая значимость этих исследований заключается в том, что они позволили не только рассчитать оба эффекта МакКарди в образцах Si и CaF₂, но и дать физическую интерпретацию этих эффектов, а также позволили рассчитать величины этих эффектов для большой совокупности монокристаллических образцов с различным типом упругой анизотропии. Практическая значимость этих результатов для микроэлектроники заключается и в том, что они позволили определить направления осей нанопроводов и ориентации плоскостей пленок для большого набора материалов, которые обеспечивают максимальный теплоотвод от элементов микросхем, необходимый для стабильной работы микроэлектронных устройств.

3. Исследование влияния упругой анизотропии и фокусировки фононов на электронный транспорт имеет как научное, так и практическое значение. Ранее в теории явлений электронного переноса в металлах [1-8] для фононов использовали модель изотропной среды, в которой учитывали релаксацию электронов только на продольных фононах. В диссертационной работе показано, что квазипоперечные фононы, имеющие значительно больший волновой вектор при фиксированной энергии фонона, вносят значительно больший вклад в электрон-фононную релаксацию, термоэдс увлечения и электросопротивление щелочных и благородных металлов, чем продольные фононы. Так, например, их вклад в электросопротивление благородных металлов, металлов при низких температурах $T << \theta_D$ превышает 97%. Эти результаты имеют большое практическое значение, поскольку они позволили количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К без использования подгоночных параметров.

Методология и методы исследования

В настоящей диссертации для решения поставленных задач использованы:

1. Феноменологическая теория упругости для расчета динамических характеристик и фокусировки фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии.

2. Метод кинетических уравнений для исследования электронного и фононного транспорта в неравновесных электрон-фононных системах. Ранее этот метод был детально апробирован и широко использован при анализе явлений электронного и фононного переноса в упруго изотропных системах. В настоящей работе он используется для исследования особенностей фононного и электронного транспорта в диэлектрических и металлических кристаллах, обусловленных упругой анизотропией кристаллов и фокусировкой фононов.

Личный вклад автора

Основные результаты, изложенные в диссертации, получены автором совместно с сотрудниками лаборатории кинетических явлений ИФМ УрО РАН (И.Г. Кулеевым, С.М. Бахаревым), а также с академиком РАН В.В. Устиновым. Личный вклад автора заключается в постановке цели и задач исследований и обсуждении их совместно с соавторами. Автор лично выполнил расчеты динамических характеристик фононов в кубических кристаллах, скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением. Автором лично проведены систематические исследования анизотропии теплопроводности в гетероструктурах GaAs/AlGaAs. Аналитические расчеты теплопроводности и длин свободного пробега фононов, электропроводности, термоэдс в кубических кристаллах и наноструктурах на их основе проделаны каждым соавтором независимо. Автор лично разработал программы расчетов кинетических и диэлектрических

кристаллах кубической симметрии. Работы [A5, A7, A10] автор выполнил без соавторов. Остальные статьи и тезисы докладов и монографии подготовлены в соавторстве с коллегами. Анализ фононного транспорта в наноструктурах на основе кристаллов из материалов для спинтроники выполнены по инициативе и личном участии академика РАН В.В. Устинова.

Степень достоверности результатов

1. Достоверность полученных в диссертации результатов определяется использованием хорошо апробированных методов расчета электронного и фононного транспорта – метод кинетических уравнений для неравновесных функций распределения квазичастиц.

2. При расчете динамических характеристик фононов в кристаллах используются экспериментально определенные значения упругих модулей. Это исключает ошибки при расчете спектров и векторов поляризации фононов, входящих в матричный элемент электрон-фононной релаксации и законы сохранения импульса и энергии квазичастиц.

3. Основным критерием достоверности является сравнение результатов расчета с экспериментальными данными. Решение задачи о влиянии фокусировки на скорость релаксации фононов в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением позволило рассчитать температурные зависимости решеточной теплопроводности в кристаллах Si и CaF₂, измеренные МакКарди с соавторами на монокристаллических образцах с квадратным и прямоугольным сечением. Учет влияния фокусировки на распространение фононов в образцах конечной количественно описать температурные длины позволил зависимости теплопроводности для всех симметричных направлений в образцах с квадратным сечением, а также зависимость теплопроводности от ориентации широкой грани для образцов с прямоугольным сечением. Поэтому достоверность результатов, полученных для фононного транспорта, как для объёмных кристаллов, так и наноструктур на их основе не вызывает сомнения.

4. Ранее выполненные расчеты в модели изотропной среды или при использовании деформационного потенциала для электрон-фононного взаимодействия приводили к расхождению результатов расчета и экспериментальных данных для электросопротивления БМ в 2-3 раза уже при температуре 300 К. Мы учли релаксацию электронов на квазипоперечных фононах, а константы взаимодействия электронов со сдвиговыми волнами определили из данных по электросопротивлению БМ в высокотемпературной области ($T >> \theta_D$). Предложенный метод определения констант взаимодействия основан на интересной и очень простой идее, высказанной Займаном [6], который показал, что в области высоких температур $T >> \theta_D$, где электросопротивление следует линейной зависимости от температуры, квантование энергии колебаний решетки не играет роли. В этом случае электросопротивление не зависит от деталей спектра фононов, а пропорционально среднему квадрату амплитуды тепловых колебаний атома,

и, соответственно, температуре. Это позволило количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ в рамках модели Блоха-Грюнайзена с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К без использования подгоночных параметров. Этот результат свидетельствует о достоверности проведенных расчетов электросопротивления благородных металлов.

Апробация результатов

Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждены на международных и российских конференциях: XVII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2016); XV Конференция – школа молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (Сочи, Россия 2016); XIII Российская конференция по физике полупроводников «Полупроводники-2017» (Екатеринбург, Россия 2017), XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2017), XIV Российская конференция по физике полупроводников «Полупроводники-2017» (Екатеринбург, Россия 2017), XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2019), XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2019), XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2019), XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2019), XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2019), 2016, 2016, 2018, 2020, 2021, 2022, 2023 года.

Исследования были выполнены в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Спин» № 01201463330), плану РАН в рамках темы «Спин» № АААА-А18-118020290104-2, в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Функция», № АААА-А19-119012990095-0, 122021000035-6), при поддержке Программы УрО РАН (проект №15-17-2-17, №12-Т-2-1018), МИНОБРНАУКИ России (грант №14.Z50.31.0025) и гранта ведущей научной школы НШ-14.120.14.1540.

Соответствие диссертации паспорту специальности.

Содержание диссертации соответствует пункту 1 Паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния "Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления".

Публикации по результатам работы

Основные результаты работы изложены в 24 статьях в журналах, включенных ВАК в Перечень ведущих рецензируемых журналов и трех монографях.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка работ автора, списка использованной литературы и одного приложения. Общий объём диссертации составляет 257 страниц, включая 29 таблиц и 90 рисунков. Список литературы включает 189 наименований на 15 страницах.

1 Распространение упругих волн и фокусировка фононов в кубических кристаллах

При исследовании физических процессов, определяющих электронный и фононный транспорт в объемных материалах [9-13, 16-23, 29-31] и наноразмерных образцах [19-24, 32-33], ранее, как правило, для описания фононов использовали модель изотропной среды. Эта модель не является адекватной для анализа распространения фононов и фононного транспорта в упруго анизотропных диэлектрических кристаллах и в наноструктурах на их основе (см., например, [12-15, 34-45]). Исследования электрон-фононной релаксации и явлений электронного переноса в целочных и благородных металлах и в наноструктурах на их основе, проведенные в работах [46-56], показали, что модель изотропной среды не дает адекватного описания таких эффектов как электросопротивление и термоэдс увлечения, как в объёмных упруго анизотропных целочных и благородных металлах, так и в наноструктурах на их основе.

При низких температурах, когда волновой вектор фонона гораздо меньше дебаевского волнового вектора, адекватным приближением для спектра и векторов поляризаций фононов в кубических кристаллах является модель анизотропного континуума. В этой модели упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями упругости второго порядка [24-27, 38], которые для большинства кристаллов экспериментально определены. Анизотропия упругой энергии приводит к ряду новых эффектов в распространении упругих волн и решеточной теплопроводности [12-15, 34, 38]. Во-первых, в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, т.е. у всех колебательных мод имеются и продольные, и поперечные компоненты [24-26, 38]. Анализ векторов поляризаций фононов в кубических кристаллах показал, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания для большинства кубических кристаллов мал, и им можно пренебречь (см. [35, 38]). Напротив, вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым, и при расчете релаксационных характеристик фононных систем необходимо учитывать продольную компоненту этих мод. Во-вторых, в отличие от изотропных сред, спектр фононов становится анизотропным и снимается вырождение поперечных колебательных мод. Детальный анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах, проведенный в работе [35], показал, что для спектра фононов может быть введен один безразмерный параметр анизотропии. В соответствии со знаком этого параметра все кристаллы кубической симметрии могут быть разделены на два типа: на кристаллы с положительной (тип I) и отрицательной (тип II) анизотропией упругих модулей второго порядка [35]. Вид спектра колебательных ветвей для кристаллов этих типов различается качественно, тогда как внутри одного типа кристаллов

спектры фононов различаются лишь количественно [35, 38]. В-третьих, анизотропия упругих свойств кубических кристаллов приводит к неколлинеарности групповой скорости и волнового вектора и, соответственно, к фокусировке или дефокусировке колебательных мод [12, 13, 15, 38]. Фононы будут распространяться преимущественно в направлениях фокусировки, в которых плотность фононных состояний (ПФС) может быть значительно больше, чем в модели изотропной среды. Однако в направлениях, близких к направлениям дефокусировки, ПФС мод может быть значительно меньше, чем в модели изотропной среды. Нами показано, что в кристаллах первого и второго типа не только анизотропия спектра и поведение векторов поляризации, но и эффекты фокусировки фононов качественно отличаются (см. [38]). Для кристаллов одного типа направления фокусировки и дефокусировки колебательных мод совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа [38]. При низких температурах, когда длина пробега фононов превышает поперечный размер образца, это может приводить к качественному отличию анизотропии электронного и фононного транспорта в кубических кристаллах различного типа.

В отличие от результатов, полученных в монографии [38], в настоящей работе мы показали, что фокусировку фононов необходимо учитывать не только при исследовании фононного транспорта в диэлектрических кристаллах. Она является актуальной при исследовании электрон-фононной релаксации и явлений электронного переноса в металлах (см. [46-57]). Ранее для этих целей главным образом использовали модель изотропной среды, в которой только продольные фононы могут давать вклад в электросопротивление и участвовать в электрон-фононном увлечении [16-23]. Учёт анизотропии упругой энергии на электронфононную релаксацию позволил проанализировать роль квазипродольных и квазипоперечных фононов, в электросопротивлении и термоэдс увлечения щелочных и благородных металлов и наноструктурах на их основе [46-56]. Показано, что вклады квазипоперечных фононов в электросопротивление, которые ранее не учитывали, при температурах гораздо меньших температуры Дебая на порядок величины превышают вклады продольных фононов для кристаллов калия [52], а для благородных металлов Au, Ag и Cu они составляют более 97%, тогда как вклады продольных фононов оказались менее 3% [53]. Исследования [54-56] показали, что фокусировка фононов оказывает большое влияние на электрон-фононное увлечение и при достаточно низких температурах приводит к анизотропии термоэдс увлечения В монокристаллических наноструктурах на основе кристаллов калия.

Поэтому здесь мы остановимся более подробно на анализе фокусировки фононов в металлических кристаллах кубической симметрии и сравним их с результатами [43], полученными ранее для диэлектрических кристаллов. В разделе 1 рассчитан спектр и векторы

поляризации фононов в щелочных и благородных металлах и проведено их сравнение с результатами для диэлектрических кристаллов. В разделе 2 проанализированы угловые зависимости групповых скоростей и особенности распространения фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. В разделе 3 исследовано влияние анизотропии упругой энергии на плотность фононных состояний в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. В разделе 4 рассчитаны коэффициенты усиления потока фононов в щелочных и благородных металлах, а также для диэлектрических кристаллов.

1.1 Динамические характеристики фононов металлических и диэлектрических кристаллов в модели анизотропного континуума

В феноменологической теории упругости состояние деформированного кристалла описывается векторным полем смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)=(u_1,u_2,u_3)$, которое задает смещение в момент времени *t* в некоторой точке, имеющей в равновесии координату $\mathbf{r}=(x_1,x_2,x_3)$. Если смещения соседних атомов в кристалле гораздо меньше расстояния между ними, то они могут быть представлены в виде непрерывно и медленно меняющегося поля смещений [24-28]. Для характеристики деформации континуума в каждой точке вводится симметричный тензор деформации η_{ik} (*i*,*j*,*k*= 1,2,3) [24-27]:

$$\eta_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \sum_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \equiv \frac{1}{2} \left(\xi_{ik} + \xi_{ki} + \sum_j \xi_{ji} \xi_{jk} \right), \tag{1.1}$$

где $\xi_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ - компоненты тензора дисторсии. В случае малых деформаций ($\xi_{ij} << 1$) пренебрегаем членами второго порядка малости. Тогда тензор деформации принимает вид:

$$\eta_{ik} = 0.5 (\xi_{ik} + \xi_{ki}). \tag{1.2}$$

Далее мы ограничимся рассмотрением кристаллов кубической симметрии. Они характеризуются наличием трех взаимно перпендикулярных осей симметрии второго и четвертого порядков и оси симметрии третьего порядка, направленной вдоль пространственной диагонали куба [24]. Плотность упругой энергии $U(\xi_{in})$ для кубических кристаллов выражается через компоненты тензора дисторсии и три модуля упругости второго порядка c_{11} , c_{12} и c_{44} :

$$U = \frac{1}{2}c_{12}\left(\sum_{i}\xi_{ii}\right)^{2} + \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})\sum_{i}\xi_{ii}^{2} + \frac{1}{4}c_{44}\sum_{i,k}\left(\xi_{ik} + \xi_{ki}\right)^{2}.$$
(1.3)

Переход к модели изотропной среды обеспечивается равенством:

$$c_{11} - c_{12} - 2c_{44} = 0. (1.4)$$

Очевидно, что плотность упругой энергии для изотропной среды определяется двумя модулями упругости второго порядка.

Для вывода уравнений движения теории упругости воспользуемся вариационным принципом. Для этого представим плотность лагранжиана в виде [26]:

$$L(\dot{u}_{i},\xi_{in}) = T(\dot{u}_{i}) - U(\xi_{in}), \quad T(\dot{u}_{i}) = \sum_{i} \frac{\rho}{2} \dot{u}_{i}^{2},$$
(1.5)

где $T(\dot{u}_i)$ - плотность кинетической энергии, а плотность упругой энергии $U(\xi_{in})$ определена выражением (1.3). Согласно вариационному принципу, интеграл $\int L(\dot{u}_i, \xi_{in}) d\mathbf{r} dt$ должен иметь экстремум при вариациях, исчезающих на границах интегрирования. Тогда получаем уравнение Эйлера для этой задачи [26]:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L(\dot{u}_{i},\xi_{in})}{\partial \dot{u}_{i}} - \sum_{n}\frac{\partial}{\partial x_{n}}\frac{\partial L(\dot{u}_{i},\xi_{in})}{\partial \xi_{in}} = 0.$$
(1.6)

Подстановка выражений (1.3) и (1.5) в уравнение (1.6) дает систему уравнений движения для компонент вектора смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ в виде [26-28]:

$$\rho \ddot{u}_{1} = c_{11} \frac{\partial^{2} u_{1}}{\partial x_{1}^{2}} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^{2} u_{2}}{\partial x_{1} \partial x_{2}} + \frac{\partial^{2} u_{3}}{\partial x_{1} \partial x_{3}} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^{2} u_{1}}{\partial x_{2}^{2}} + \frac{\partial^{2} u_{1}}{\partial x_{3}^{2}} \right),$$

$$\rho \ddot{u}_{2} = c_{11} \frac{\partial^{2} u_{2}}{\partial x_{2}^{2}} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^{2} u_{1}}{\partial x_{1} \partial x_{2}} + \frac{\partial^{2} u_{3}}{\partial x_{2} \partial x_{3}} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^{2} u_{2}}{\partial x_{1}^{2}} + \frac{\partial^{2} u_{2}}{\partial x_{3}^{2}} \right),$$

$$\rho \ddot{u}_{3} = c_{11} \frac{\partial^{2} u_{3}}{\partial x_{3}^{2}} + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^{2} u_{1}}{\partial x_{1} \partial x_{3}} + \frac{\partial^{2} u_{2}}{\partial x_{2} \partial x_{3}} \right) + c_{44} \left(\frac{\partial^{2} u_{3}}{\partial x_{2}^{2}} + \frac{\partial^{2} u_{3}}{\partial x_{3}^{2}} \right),$$

$$(1.7)$$

Воспользуемся (1.3) и представим систему уравнений (1.7) в более компактном виде [12]:

$$\rho \ddot{u}_{i} = (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \frac{\partial^{2} u_{i}}{\partial x_{i}^{2}} + (c_{12} + c_{44}) \nabla_{i} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + c_{44} \Delta u_{i}, \qquad (1.8)$$

где ∇ - оператор градиента, Δ - оператор Лапласа. При c_{11} - c_{12} - $2c_{44}$ =0 первое слагаемое в выражении (1.8) обращается в нуль, тогда для упруго изотропной среды получаем известный результат [25, 26]:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = (c_{11} - c_{44}) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + c_{44} \Delta \mathbf{u} .$$
(1.9)

Это уравнение обладает одним важным свойством: оно инвариантно относительно поворота осей, так как каждый член уравнения представляет собой инвариант. Таким образом, соотношение (1.4) представляет собой условие того, что кристалл является упруго изотропным. В таком кристалле фазовые скорости изотропны и совпадают по направлениям с групповыми скоростями, поперечные моды вырождены, а скорости продольных не совпадают со скоростями поперечных волн [25, 26]. В монографии [27] фактор анизотропии кубических кристаллов определен следующим соотношением

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}.$$
(1.10)

Для упруго изотропных материалов A=1 и, соответственно, $2c_{44}=c_{11}-c_{12}$.

Решения системы уравнений (1.7) представим в виде плоских монохроматических волн, для которых вектор смещения можно записать в виде:

$$\mathbf{u} = A\mathbf{e}(\mathbf{q})\exp[i(\omega t - \mathbf{q}\mathbf{r})], \qquad (1.11)$$

где $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ - волновой вектор, $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ - вектор поляризации. Он указывает направление, в котором колеблются частицы вещества. Если вектор $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ параллелен волновому вектору \mathbf{q} , то волна называется *продольной*. Если вектор $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ перпендикулярен волновому вектору \mathbf{q} , то волна называется *поперечной*. Как мы увидим далее, в кубических кристаллах из-за анизотропии упругой энергии упругие волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными. Для того чтобы плоская волна, определяемая выражением (1.11), могла быть решением уравнений движения (1.7), должно выполняться определенное соотношение между частотой ω и волновым числом q, которое называется дисперсионным соотношением. В модели анизотропного континуума предполагается, что волновой вектор фонона \mathbf{q} гораздо меньше дебаевского волнового вектора \mathbf{q}_D , и спектр фононов с поляризаций λ может быть представлен в виде:

$$\omega_q^{\lambda} = S^{\lambda}(\theta, \varphi)q. \tag{1.12}$$

Подстановка решения в виде плоской волны (1.11) в уравнения движения (1.7) дает систему уравнений Кристоффеля [24, 28] для определения векторов поляризаций **e**(**q**) и спектра фононов. В работе [35] показано, что в системе координат по ребрам куба она может быть представлена в виде:

$$\sum_{j} e_{j} \left\{ \left(n_{i} n_{j} - \varepsilon \delta_{ij} \right) + (k - 1) n_{i} n_{j} (1 - \delta_{ij}) \right\} = 0, \quad \varepsilon = \frac{S_{0} (\theta, \varphi)^{2} \rho - c_{44}}{c_{11} - c_{44}}.$$
(1.13)

Здесь $n_j = q_j/q$ – проекции единичного вектора фонона **n** = (sin θ cos φ , sin θ sin φ , cos θ) на соответствующие оси координат, δ_{ij} - символ Кронекера. Из уравнений (1.13) следует, что безразмерный параметр *k*-1 является единственным параметром, который характеризует влияние упругой анизотропии на спектр и векторы поляризации упругих волн в кубических кристаллах [35]:

$$k - 1 = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}} - 1 = \frac{c_{12} + 2c_{44} - c_{11}}{c_{11} - c_{44}}.$$
(1.14)

Из условия существования нетривиального решения системы однородных уравнений (1.14) находим кубическое уравнение для спектра фононов:

$$\varepsilon^{3} - \varepsilon^{2} - (k^{2} - 1)\varepsilon\xi - (1 - k)^{2}(2k + 1)\eta = 0, \qquad (1.15)$$

где $\xi = n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2$ и $\eta = n_x^2 n_y^2 n_z^2$ - кубические гармоники. Уравнение (1.15) имеет три решения, для трех акустических мод: продольной (*L*) и двух поперечных (*t*₁, *t*₂) [35]:

$$S_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^{\lambda}\right)^{1/2}, \quad \varepsilon^{\lambda} = \frac{1}{3} + z^{\lambda},$$

$$z^{L} = \frac{2}{3}r\cos\frac{Q}{3}, \qquad z^{t_{1},t_{2}} = \frac{2}{3}r\cos\left(\frac{Q}{3} + \frac{2\pi}{3}\right),$$

$$r = \sqrt{1 + 3(k^{2} - 1)\xi}, \ \cos Q = \frac{1}{r^{3}} \left(1 + 4.5(k^{2} - 1)\xi + 13.5\eta \left(1 - 3k^{2} + 2k^{3}\right)\right).$$
(1.16)

Индексы поляризации фононов t₁ и t₂ соответствуют «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам. Далее будет показано, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев является физически некорректным.

Подстановка решений (1.16) в систему уравнений (1.13) позволяет определить векторы поляризации фононов различных колебательных ветвей [35]:

$$e_{j}^{\lambda} = \frac{1}{A^{\lambda}} \left\{ \frac{n_{j}}{\psi_{j}^{\lambda}} \right\}, \quad A^{\lambda} = \pm \sqrt{\sum_{j} \frac{n_{j}^{2}}{\left(\psi_{j}^{\lambda}\right)^{2}}}, \quad (\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n}) = \frac{1}{A^{\lambda}} \sum_{j} \frac{n_{j}^{2}}{\psi_{j}^{\lambda}}, \quad \psi_{j}^{\lambda} = \varepsilon^{\lambda} + (k-1)n_{j}^{2}. \tag{1.17}$$

Нетрудно убедиться, что для векторов поляризаций выполняются соотношения:

 $(\mathbf{e}^{\lambda},\mathbf{e}^{\lambda'})=\delta_{\lambda,\lambda'}.$

Отметим, что формулы (1.17) просты, однако использование их при расчетах частот релаксации фононов затруднено из-за возникающих при этом неопределенностей типа 0/0 для определенных симметричных направлений (см. ниже). Для определения векторов поляризации e_j в этих направлениях приходится возвращаться к исходной системе (1.13).

Для изотропной среды параметр *k*-1=0, и уравнение (1.15) сводится к виду:

$$\varepsilon^2 (\varepsilon - 1) = 0. \tag{1.18}$$

Одно из его решений дает фазовую скорость продольных фононов $S^{L} = \sqrt{c_{11}/\rho}$. Два других решения совпадают и дают фазовые скорости поперечных фононов $S^{\prime 1} = S^{\prime 2} = \sqrt{c_{44}/\rho}$. Для векторов поляризации имеем $e^{L}=n$ и ($e^{t}n$)=0. Таким образом, в изотропной среде могут распространяться чисто продольные и чисто поперечные волны с фиксированными скоростями, которые определяются двумя модулями упругости второго порядка c_{11} , c_{44} и плотностью кристалла ρ . В отличие от изотропных сред, в кубических кристаллах распространяются вказипродольные или квазипоперечные колебания. Для каждого направления волнового вектора в кристалле существуют три независимые волны со своими фазовыми скоростями $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и взаимно перпендикулярными смещениями.



Рисунок 1.1 – Угловые зависимости скоростей звука $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ (10⁵ см/с) в кристаллах Si (*a*, *в*) и KCl (*б*, *г*) для волнового вектора, лежащего в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (*a*, *б*) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (*в*, *г*). Кривые 1 – для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 – для квазипоперечных мод t_1 и t_2 , соответственно.

Как видно из рисунков 1.1, для кубических кристаллов скорости звука и, соответственно, спектры фононов существенно отличаются от изотропных сред. Следует отметить, что анизотропия спектра и наличие точек вырождения в колебательных модах поперечных фононов приводит к существенным отличиям скоростей релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния в кубических кристаллах в отличии от изотропных сред [68, 69]. Важную роль в анизотропии спектра и угловых зависимостей векторов поляризации фононов играет абсолютная величина и знак параметра $k-1=(c_{12}+2c_{44}-c_{11})/(c_{11}-c_{44})$. В работе [35] (см. также [38]) показано, что в соответствии со знаком параметра k-1 все кубические кристаллы могут быть

разделены на два типа: на кристаллы с положительной k-1>0 и отрицательной k-1<0 анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу 1.1). К первому типу (k-1>0) относятся диэлектрические кристаллы Ge, Si, алмаз, GaSb и т.д., а также металлы: щелочные - Na, Li, K, Rb, Cs и благородные Au, Ag и Cu, и ряд других (см. таблицу 1.1). Ко второму типу кубических кристаллов (k-1<0) относятся кристаллы KCl, NaCl, и т.д., а также ряд металлов (см. таблицу 1.1).

Анализ спектров фононов в кристаллах различного типа показал, что угловые зависимости фазовых скоростей для всех акустических мод в кубических кристаллах одного типа качественно подобны: максимальные и минимальные значения фазовых скоростей для всех кристаллов достигаются в одних и тех же направлениях (см. рисунок 1.1а). Они отличаются только большей или меньшей анизотропией фазовых скоростей. Как видно из рисунка 1.1, угловые зависимости фазовых скоростей для всех акустических мод в кубических кристаллах разного типа качественно отличаются: направления, соответствующие максимальным значениям фазовых скоростей в кристаллах первого типа, соответствующие максимальным значениям фазовых скоростей в кристаллах первого типа, соответствуют минимальным значениям для кристаллов второго типа. Так, например, для кристаллов Si первого типа (*k*-1>0) в направлении [100] скорость продольных фононов – минимальна, а поперечных фононов – максимальна, тогда как в направлении [111] скорость продольных фононов – максимальна, а поперечных фононов – минимальна в направлении [110] (см. рисунок 1.1 а, в). В противоположность этому для кристаллов KCl второго типа скорость продольных фононов максимальна в направлении [110] и минимальна в направлении [110] (см. рисунок 1.1 а, г).

Основной проблемой нашего анализа является исследование влияния анизотропии упругой энергии и фокусировки фононов на фононный транспорт в диэлектрических кристаллах, а также на электрон-фононную релаксацию и явления электронного переноса в щелочных и благородных металлах, которые относятся к кристаллам первого типа. В этих металлах при низких температурах подсистема электронов является сильно вырожденной. В этом случае благодаря законам сохранения энергии и импульса в электрон-фононной релаксации могут участвовать только электроны, находящиеся в пределах теплового размытия поверхности Ферми. Поэтому при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, основной вклад в релаксацию электронов будут вносить длинноволновые фононы с волновым вектором $q <<q_D (q_D - дебаевский волновой вектор) [46-48]. В связи с этим для фононов мы воспользуемся моделью анизотропного континуума [49-57]. В этой модели спектр фононов <math>\omega_q^2 = S^2(\Theta, \varphi)q$, фазовая скорость $S^{\lambda}(\varphi, \theta)$ и векторы поляризации определены формулами (1.16)-(1.17). Значения модулей упругости второго порядка при T = 4.2 К взяты из работы [25] (см. также таблицу 1.1). Параметры анизотропии k-1 в щелочных кристаллах значительно превышают таковые для Si (см. таблицу 1.1). Отметим, что

Таблица 1.1 – Упругие модули второго порядка c_{ij} (10¹² дин/см²), плотность ρ (г/см³) и классификация кубических кристаллов в соответствии с параметром анизотропии k–1. Данные взяты из работ [25, 58-67].

Тип	Кристалл	<i>c</i> ₁₁	C12	C44	ρ	<i>k</i> -1	Степень ионности
							связи
Ι	Ge	1.289	0.483	0.671	5.32	0.87	0
	Si	1.677	0.65	0.804	2.3301	0.67	0
	Алмаз	10.76	1.25	5.76	3.512	0.40	0
	GaAs	1.1904	0.5384	0.5952	5.317	0.90	0.12
	HgSe	0.69	0.51	0.23	8.26	0.61	0.15
	GaN	2.93	1.59	1.55	6.15	1.275	0.43
	GaSb	0.885	0.404	0.433	5.62	0.85	0.26
	InSb	0.672	0.367	0.302	5.76	0.81	0.32
	LiF	1.246	0.424	0.649	2.646	0.78	0.92
	MgO	3.0617	0.9378	1.5758	3.58	0.69	0.84
	YAG	3.281	1.064	1.137	4.55	0.03	
	К	0.0457	0.0374	0.0263	0.91	2.284	металл
	Li	0.148	0.125	0.108	0.55	4.825	
	Na	0.0615	0.0469	0.0592	1.01	45.13	
	Rb	0.0342	0.0288	0.021	1.53	2.77	
	Cs	0.0236	0.02194	0.0148	1.87	3.18	
	Au	2.016	1.697	0.454	19.49	0.38	
	Ag	1.315	0.973	0.511	10.64	0.85	
	Cu	1.684	1.214	0.754	8.94	1.116	
	Pb	0.466	0.392	0.144	11.34	0.655	
	Ni	2.465	0.473	1.247	8.9	0.412	
	Fe	2.43	1.38	1.22	7.87	1.15	
	Al	1.069	0.626	0.285	2.7	0.162	
II	KCl	0.398	0.062	0.0625	1.98	-0.63	0.95
	NaCl	0.575	0.099	0.133	2.214	-0.48	0.94
	PbS	1.27	0.298	0.248	7.5	-0.466	0.20
	CaF2	1.74	0.56	0.359	3.211	-0.33	0.89
	SrF2	1.24	0.43	0.31	2.44	-0.204	0.89
	YIG	2.69	1.077	0.764	5.17	-0.04	
	Мо	4.6	1.76	1.1	10.19	-0.183	металл
	W	5.01	1.98	1.514	19.2	-0.001	

для кристаллов Na это превышение составляет почти два порядка величины. Поэтому фокусировка фононов оказывает существенно большее влияние на распространение и электронфононную релаксацию в щелочных, чем в полупроводниковых кристаллах (см. подробнее [46-57]). Для анализа электросопротивления и термоэдс увлечения щелочных и благородных металлов рассчитаем спектры и векторы поляризации фононов и сравним их с соответствующими величинами для полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, таких как Si и KCl.

Как видно из сравнения рисунков 1.1, 1.2 и 1.3, фазовые скорости фононов в металлических кристаллах отличаются значительно большей анизотропией, по крайней мере, это относится к медленной поперечной моде. Так, например, в кристаллах Na, K, Au и Cu для волновых векторов в плоскости грани куба отношения фазовых скоростей для медленной *t*₂-моды в направлениях [100] и [110] составляют 2.9, 2.5, 1.7 и 1.8, соответственно. Однако для Si оно значительно меньше, и составляет всего 1.25. Фазовая скорость продольных фононов в плоскости грани куба достигает максимальных значений в направлении [110], превосходя минимальные в направлении [100] в 1.36, 1.22, 1.07 и 1.14 раза в кристаллах Na, K, Au и Cu, соответственно. Аналогичным образом ведёт себя анизотропия фазовых скоростей фононов и в диагональной плоскости (см. рисунок 1.1, 1.2, 1.36). Что касается векторов поляризации фононов, то для произвольного направления (не совпадающего ни с одним из симметричных направлений) в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания. При этом вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах и первого, и второго типа мал, и им можно пренебречь. Однако вклад продольной компоненты в квазипоперечные колебания не является малым: его максимальные значения для медленной t₂моды составляют 14 и 16.5% для кристаллов Si и Ge [38] и достигают, согласно нашим оценкам, 70%, 60% и 30% для кристаллов Na, Li и K, соответственно. Среднее значение $<(e^{t^2}n)^2>$, входящее в константу деформационного потенциала для электрон-фононного взаимодействия, при



Рисунок 1.2 – Угловые зависимости скоростей звука $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ (10⁵ см/с) в кристаллах К (кривые 1, 2, 3) и Na (кривые 1a, 2a, 3a) для волновых векторов в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (*a*) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (δ). Кривые 1 – для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 – для квазипоперечных мод t_1 и t_2 , соответственно.



Рисунок 1.3 – Угловые зависимости скоростей звука $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ (10⁵ см/с) для Си (кривые 1, 2, 3) и Аu (кривые 1a, 2a, 3a) для волновых векторов в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (*a*) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (*б*). Кривые 1 – для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 – для квазипоперечных мод t_1 и t_2 , соответственно.

переходе от кристаллов Si к калию увеличивается в четыре раза и превышает 3% (см. таблицу 1.2). Это приводит к значительному возрастанию вклада квазипоперечных мод в электронфононную релаксацию в рамках теории деформационного потенциала. Для кристаллов Rb и Cs среднее значение продольной компоненты составляет 4%, для Li - 5%, а для Na - превышает 9% (см. таблицу 1.2). Для быстрой поперечной моды усредненные величины $\langle (e^{t_1} \mathbf{n})^2 \rangle$ оказываются на порядок меньше, чем для медленной t_2 -моды. Поэтому следует ожидать, что вклад этой моды в термоэдс увлечения будет мал. Однако для продольных фононов фактор $\langle (e^t \mathbf{n})^2 \rangle$ мало отличается от единицы. Поэтому далее мы рассмотрим угловые зависимости векторов поляризации для двух наиболее актуальных случаев, которые допускают аналитические решения, а именно: (1) для волновых векторов в плоскостях граней куба, (2) для волновых векторов в диагональных плоскостях. Для волнового вектора фонона, лежащего в плоскости XZ, единичный волновой вектор $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, функции $\xi = n_x^2 n_y^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, $\eta = 0$, а кубическое уравнение сводится к виду:

$$\varepsilon \left(\varepsilon^2 - \varepsilon - \left(k^2 - 1\right)\xi\right) = 0.$$
(1.19)

Его решение для продольных и поперечных мод имеет вид:

$$\varepsilon^{t^1} = 0, \qquad \varepsilon^{L,t^2} = 1/2 \pm \sqrt{1/4 + (k^2 - 1)\xi},$$

кристалл	<i>k</i> -1	$\langle (\mathbf{e}^L \mathbf{n})^2 \rangle$	$\langle (\mathbf{e}^{t1}\mathbf{n})^2 \rangle$	$<({\bf e}^{t^2}{\bf n})^2>$
GaAs	0.90	0.98	0.0016	0.017
Si	0.67	0.99	7.5.10-4	7.9·10 ⁻³
Li	4.825	0.942	0.0044	0.054
Na	45.13	0.902	0.0069	0.091
K	2.284	0.965	0.0028	0.032
Rb	3.7727	0.9591	0.0032	0.038
Cs	4.175	0.9549	0.0035	0.042
Au	0.382	0.996	3.22.10-4	3.3.10-3
Ag	0.766	0.988	1.03.10-3	1.1.10-2
Cu	1.116	0.982	1.5.10-3	1.7.10-2

Таблица 1.2 – Усредненные векторы поляризации и параметр анизотропии *k*-1.

$$S_0^{t_1} = S_{[100]}^t, \quad S_0^{L,t^2} = S_{[100]}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}}} \varepsilon^{L,t^2}.$$
(1.20)

Подстановка этих решений в (1.13) (или использование формул (1.17)) дает выражение для векторов поляризации:

$$\mathbf{e}^{t_{1}}(\theta) = \{0,1,0\}, \quad (\mathbf{e}^{t_{1}}\mathbf{n}) = 0, \quad e_{x}^{t_{2}} = \frac{n_{x}\psi_{z}sign(n_{z}\psi_{z})}{\psi_{2}}, \quad e_{y}^{t_{2}} = 0, \quad \psi_{x,z} = \varepsilon^{t_{2}} + (k-1)n_{x,z}^{2}, \quad (1.21)$$

$$e_{z}^{t_{2}} = \frac{n_{z}\psi_{x}sign(n_{z}\psi_{z})}{\psi_{2}} = -\sqrt{1 - (e_{x}^{t_{2}})^{2}}, \quad \psi_{2} = \sqrt{\varepsilon^{t_{2}}(1 + 4(k-1)\xi) + 2k(k-1)\xi}, \quad (1.21)$$

$$(\mathbf{e}^{t_{2}}\mathbf{n}) = \delta^{t_{2}} = \frac{sign(n_{z}\psi_{z})}{\psi_{2}} (\varepsilon^{t_{2}} + 2(k-1)\xi) = \cos(\theta_{e} - \theta),$$

где θ_e – угол между вектором поляризации e^{t^2} и осью Z. Итак, быстрая t_1 -мода является чисто поперечной с вектором поляризации, направленным перпендикулярно плоскости XZ. Она является быстрой для кубических кристаллов с положительной анизотропией модулей второго порядка (k–1>0) и медленной для кристаллов с отрицательной анизотропией модулей (k–1<0). Мода t_2 в общем случае является смешанной поперечно-продольной модой. Для нее вектор поляризации лежит в плоскости XZ. Причем в кристаллах I типа (Ge, Si) она соответствует медленной t_2 -моде, а в кубических кристаллах второго типа (KCl, NaCl) она является быстрой поперечной модой (см. рисунок 1.1). Продольная компонента медленной t_2 -моды δ^{t^2} характеризует отклонение вектора поляризации e^{t^2} от чистой моды. Максимальные значения продольных компонент t_2 -моды δ^{t^2} составляют 15.5% для кристаллов Ge и достигают 24% для KCl. В благородных металлах δ^{t^2} достигает примерно таких же значений, в золоте максимальные

значения составляют 9%, в меди - 20%. Однако для щелочных металлов К и Na продольная компонента медленной t_2 -моды δ^{t2} достигает 30 и 60 %, соответственно. Как видно из рисунков 1.4 (кривые 1' и 2') и 1.5 (кривые 3' и 4'), величина ($e^{L}\mathbf{n}$)=1- δ^{L} мало отличается от единицы для большинства диэлектриков, при этом параметр δ^{L} <0.02 для кристаллов типа Ge, Si, алмаза, GaSb, и δ^{L} <0.03 для кристаллов типа KCl. В отличие от полупроводников, в щелочных металлах поперечная компонента *L*-моды может достигать существенно больших значений: так, например, в кристаллах K она достигает 0.04, а в Na увеличивается до 0.2 (см. рисунок 1.5). Абсолютные значения |k-1|, которые характеризуют анизотропию упругих свойств кубических кристаллов, убывают при переходе от кристаллов Ge к Si, алмазу и кристаллам YAG, поэтому максимальные значения δ^{t2} уменьшаются от 12.6% для кристаллов Si, 8.4% для алмаза, 9.1% для NaCl и исчезающе малых значений для YAG и YIG. Более интересные результаты дает анализ спектра и векторов поляризации для диагонального сечения: $\varphi = \pi/4$, $\mathbf{n} = (\sin \theta / \sqrt{2}, \sin \theta / \sqrt{2}, \cos \theta)$, $\xi = 2n_x^2 (1-3/2n_x^2)$, $\eta = n_x^4 (1-2n_x^2)$. В этом случае кубическое уравнение (1.15) может быть факторизовано для функции $\psi_x = \varepsilon + (k-1)n_x^2$:

$$\psi_{x} \left[\psi_{x}^{2} - \psi_{x} (1 + 3(k - 1)n_{x}^{2}) + 2k(k - 1)n_{x}^{2} (3n_{x}^{2} - 1) \right] = 0.$$
(1.22)

Проведенный анализ показал, что вектор поляризации быстрой *t*₁-моды перпендикулярен диагональной плоскости, и это решение является единственным:

$$\mathbf{e}^{t_1} = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0), (\mathbf{e}^{t_1}, \mathbf{n}) = 0.$$
 (1.23)

Таким образом, *t*₁-мода является чисто поперечной, несмотря на то что спектр фононов для нее является анизотропным (см. рисунок 1.1 в, г). Этот результат на первый взгляд может показаться



Рисунок 1.4 – Угловые зависимости величин δ^L и δ^{t2} , характеризующих отклонения векторов поляризации от чистых мод, для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). 1, 1' – для кристаллов Si, 2, 2' – для NaCl и 3, 3' – для К. 1, 2, 3 – для квазипоперечных мод и 1', 2', 3' – для квазипродольных мод.



Рисунок 1.5 – Угловые зависимости величин δ^L и δ^{t2} , характеризующие отклонения векторов поляризации от чистых мод, для волновых векторов в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). 1 – для кристаллов Au, 2 – для Cu, 3 и 3' – для K, 4 и 4' – для Na. Кривые 1, 2, 3, 4 - для медленных t_2 -мод и 3',4' – для квазипродольных мод.

неожиданным, поскольку согласно представлениям, основанным на модели изотропной среды, следует, что чистым модам соответствуют изотропные спектры колебательных ветвей, а анизотропия спектра поперечных колебательных мод должна приводить к отклонению от взаимной перпендикулярности волнового вектора фонона и вектора поляризации. Однако из симметрийного анализа упругих волн в кристаллах (см. [24]) следует, что для волновых векторов, лежащих в плоскости симметрии или в плоскости, перпендикулярной оси симметрии четного порядка, одна из трех нормальных волн будет чисто поперечной, а ее смещение будет перпендикулярным рассматриваемой плоскости. Диагональная плоскость ($\varphi=\pi/4$) является как раз плоскостью симметрии кубического кристалла, поэтому полученный выше результат согласуется с анализом, проведенным в [24]. Отметим, что t_1 -мода является быстрой для кубических кристаллов I типа (и медленной для кристаллов II типа) в области углов - $\theta_{111} < \theta < \pi + \theta_{111} < (\theta < 2\pi - \theta_{111})$ она является медленной для кубических кристаллов II типа и вобласти углов I типа (и быстрой для кристаллов II типа). Два других решения уравнений (1.20) соответствуют продольной и второй поперечной моде:

$$\psi_{x}^{L,t^{2}} = \frac{1}{2} \left(1 + 3(k-1)n_{x}^{2} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 + 3(k-1)n_{x}^{2} \right)^{2} - 2k(k-1)n_{x}^{2}} (3n_{x}^{2} - 1),$$

$$S_{0}^{L,t^{2}} = S_{[100]}^{t} \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}}} \varepsilon^{L,t^{2}}, \qquad \varepsilon^{L,t^{2}} = \psi_{x}^{L,t^{2}} - (k-1)n_{x}^{2}.$$

$$(1.24)$$

Мода *t*₂ в общем случае является смешанной поперечно-продольной модой. Отметим, что *t*₂-мода является медленной для кубических кристаллов I типа (и быстрой для кристаллов II типа)

в области углов $-\theta_{[111]} < \theta < \theta_{[111]}$ и $\pi - \theta_{[111]} < \theta < \pi + \theta_{[111]}$, а в области углов $\theta_{[111]} < \theta < \pi + \theta_{[111]}$ и $\pi + \theta_{[111]} < \theta < 2\pi - \theta_{[111]}$ она является быстрой для кубических кристаллов I типа (и медленной для кристаллов II типа) (см. рисунок 1.1). Таким образом, в направлении [111] происходит не касание верхней и нижней поперечных ветвей, а пересечение поперечных мод. Итак, разделение поперечных мод на быстрые и медленные в этом случае не является физически корректным, и при классификации поперечных мод необходимо учитывать их векторы поляризации. Вектор поляризации t_2 -моды лежит в диагональной плоскости и имеет вид:

$$e_{x}^{t^{2}} = e_{y}^{t^{2}} = \frac{n_{x}\psi_{z}sign(n_{z}\psi_{z})}{\psi_{2}}, \quad e_{z}^{t^{2}} = \frac{n_{z}\psi_{x}sign(n_{z}\psi_{z})}{\psi_{2}} = -\sqrt{1-2(e_{x}^{t^{2}})^{2}},$$

$$\psi_{x} = \psi_{y} = \varepsilon^{t^{2}} + (k-1)n_{x}^{2}, \quad \psi_{z} = \varepsilon^{t^{2}} + (k-1)n_{z}^{2}, \quad \psi_{2} = \sqrt{2n_{x}^{2}\psi_{z}^{2} + n_{z}^{2}\psi_{x}^{2}},$$

$$(\mathbf{e}^{t^{2}}\mathbf{n}) = \delta^{t^{2}} = \frac{(2n_{x}^{2}\psi_{z} + n_{z}^{2}\psi_{x})}{\psi_{2}}sign(n_{z}\psi_{z}) = \cos(\vartheta_{e} - \vartheta).$$
(1.25)

Проведенный анализ показал, что для волновых векторов, лежащих в плоскостях с углом $\varphi \neq 0$, $\pi/4$, $3\pi/4$, $5\pi/4$, $7\pi/4$, обе квазипоперечные моды являются смешанными поперечнопродольными модами с точкой вырождения в направлении [001]. Они могут быть классифицированы как «быстрые» и «медленные» моды, поскольку $S^{t1}(\theta, \varphi) \ge S^{t2}(\theta, \varphi)$. Их векторы поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} в значительной степени отличаются от векторов поляризации чистых мод \mathbf{e}^{t1} =(-sin φ , cos φ , 0) в плоскости φ =const. На рисунках 1.6 и 1.7 приведены угловые зависимости z-компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} , а также величин δ^{t1} и δ^{t2} для кристаллов калия и для меди. Как видно из рисунка 1.6, вектор поляризации быстрой квазипоперечной моды \mathbf{e}^{t1} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{t1} , перпендикулярному плоскости φ =const, а при увеличении



Рисунок 1.6 – Угловые зависимости z-компоненты векторов поляризации e^{t1} и e^{t2} для K (a) и Cu (б). Кривые 1, 3 – для быстрой моды, 2, 4 – для медленной моды. 1, 2 – для угла $\varphi = \pi/4$; 3, 4 – для угла $\varphi = \pi/6$. Точечные линии – для чистых поперечных мод.



Рисунок 1.7 – Угловые зависимости величин δ^{t1} и δ^{t2} для К (а) и Сu (б). Кривые 1, 3 – для быстрой t_1 -моды, 2, 4 – для медленной t_2 -моды. 1, 2 – для угла $\varphi = \pi/4$; 3, 4 – для угла $\varphi = \pi/6$.

угла θ отклоняется от вектора $\mathbf{e}_0^{t_1}$ и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t_2}$, т.е. переходит в плоскость φ =const (см. рисунок 1.6). С другой стороны, вектор поляризации медленной моды e^{t^2} при $\theta \rightarrow 0$ стремится к вектору $\mathbf{e}_0^{t^2}$, лежащему в плоскости φ =const, а при увеличении угла θ он выходит из этой плоскости и при $\theta \rightarrow \pi/2$ стремится к вектору \mathbf{e}_0^{t1} , т.е. к направлению, перпендикулярному плоскости ϕ =const. Чем ближе угол ϕ к значению $\pi/4$, тем более резко изменяются угловые зависимости компонент векторов поляризации e^{t1} и e^{t2} в окрестности угла $\theta = \theta_{1111}$ (см. рисунок 1.6). Максимальные значения продольных компонент квазипоперечных мод δ^{t1} и δ^{t2} не превышают 20% для кристаллов Си и 30% для К (см. рисунок 1.7). Однако величины и угловые зависимости компонент векторов поляризации \mathbf{e}^{t1} и \mathbf{e}^{t2} квазипоперечных мод и соответствующих им чистых мод $\mathbf{e}_0^{t_1}$ и $\mathbf{e}_0^{t_2}$ отличаются более значительно. Заметим, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в этом случае также мал, и им можно пренебречь. Можно отметить одно следствие из полученных результатов. Поскольку электрон-фононное взаимодействие через потенциал деформации в металлах и полупроводниках пропорционально скалярному произведению ($e^{\lambda}q$), то из-за наличия продольной компоненты в квазипоперечных колебаниях электроны могут «релаксировать» свой импульс на этих колебаниях. С другой стороны, квазипоперечные моды могут передавать свой импульс электронам и усиливать эффект электрон-фононного увлечения в щелочных и благородных металлах.

Итак, в первом разделе рассчитан спектр и вектора поляризации фононов в щелочных и благородных металлах и проведено их сравнение с результатами для диэлектрических кристаллов. Показано, что спектр и векторы поляризации фононов в рассматриваемых металлах, относящихся к первой группе кубических кристаллов, качественно не отличаются от других

кристаллов первой группы. Однако анизотропия спектра для них существенно выше, чем для кристаллов типа Ge и Si. Векторы поляризации медленной *t*₂-моды для них имеют аномально большую продольную компоненту по сравнению с полупроводниковыми кристаллами типа Ge и Si: для кристаллов Na, Li и K она достигает 70, 60 и 30%, соответственно. Как мы увидим далее, это приведет к значительно большему влиянию медленной *t*₂-моды на электрон-фононную релаксацию и термоэдс увлечения в щелочных и благородных металлах.

1.2 Групповая скорость и особенности распространения фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии

В изотропной среде направления групповой и фазовой скоростей фононов совпадают с направлением волнового вектора. Эффект фокусировки отсутствует: плотность фононных состояний (ПФС) изотропна – она постоянна для всех направлений (рисунок 1.8а). В упруго анизотропных кристаллах из-за неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в кристаллической решетке [12-15, 34, 38]. Таким образом, в кристаллах возникают направления, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды [36-46]. Для иллюстрации этого эффекта на рисунке 1.8 приведены три случая изоэнергетической поверхности. В двух из них поверхности постоянной частоты в сечении имеют вид квадрата со сторонами, перпендикулярными направлениям типа [100] и [101]. Поэтому групповая скорость фононов, перпендикулярная изоэнергетической поверхности, будет направлена вдоль [100] в



Рисунок 1.8 – Схема сечений изоэнергетических поверхностей, иллюстрирующая фокусировку фононов: (*a*) – изотропный случай, (*б*) – фокусировка в направлении [100], (*в*) – фокусировка в направлении [101].

первом случае и вдоль [101] – во втором. Очевидно, что в первом случае фононы фокусируются в направлениях типа [100] и дефокусируются в направлениях типа [101]. Во втором случае – наоборот: фокусировка фононов происходит в направлениях [101], а дефокусировка – в направлениях [100].

Рассмотрим влияние фокусировки на распространение фононов в щелочных металлах, таких как Na, K, Rb и Cs. Затем сравним с результатами, полученными для диэлектрических и полупроводниковых кристаллов (см. [38]). Важной характеристикой, определяющей направление распространения фононов и, соответственно, фононный транспорт в упруго анизотропных кристаллах, является групповая скорость. Для произвольного направления волнового вектора она может быть представлена в виде [70]:

$$\mathbf{V}_{g}^{\lambda}(\theta,\varphi) = S^{\lambda}(\theta,\varphi) \widetilde{\mathbf{V}}_{g}^{\lambda}(\theta,\varphi), \quad \widetilde{\mathbf{V}}_{g}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \mathbf{n} + S_{\theta}^{\lambda}\mathbf{e}_{\theta} + S_{\varphi}^{\lambda}\mathbf{e}_{\varphi},$$
$$S_{\theta}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \left(\frac{1}{S^{\lambda}}\right)\frac{\partial S^{\lambda}}{\partial \theta}, \quad S_{\varphi}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{S^{\lambda}}\right)\frac{\partial S^{\lambda}}{\partial \varphi}.$$
(1.26)

Здесь $\mathbf{e}_{\theta} = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta), \mathbf{e}_{\varphi} = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0), \mathbf{n} - единичный волновой вектор фонона. Векторы$ **n** $, <math>\mathbf{e}_{\theta}$ и \mathbf{e}_{φ} образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов. Для определения направлений групповых скоростей акустических мод в кубических кристаллах и оценки влияния фокусировки фононов на распространение фононов необходимо построить изоэнергетические поверхности или поверхности постоянной частоты [71, 72]

$$\mathbf{q} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\omega}^{\lambda} / S^{\lambda}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}) \,. \tag{1.27}$$

Из определения (1.27) следует, что вектор групповой скорости фонона \mathbf{V}_{g}^{λ} будет ортогонален изоэнергетической поверхности. Это позволяет однозначно сопоставить волновым векторам фононов соответствующие векторы групповых скоростей для всех акустических мод и определить углы между их направлениями. В теории упругих волн используют другие определения эквивалентной изоэнергетической поверхности: поверхность медленности [14], обратная поверхность [72] или поверхность рефракции [24]. Эти поверхности можно получить из изоэнергетической поверхности путем деления выражения (1.27) на частоту ω [15, 24, 72]. Поверхность медленности является геометрическим местом концов векторов ζ^{λ} , отложенных от одной точки:

$$\boldsymbol{\zeta}^{\lambda} = \mathbf{q} / \boldsymbol{\omega}^{\lambda} = \mathbf{n} / \boldsymbol{S}^{\lambda}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}).$$
(1.28)

В отечественной литературе для этой поверхности чаще используют термин изоэнергетическая поверхность [71]. Поэтому мы будем придерживаться этой терминологии. Графическое изображение изоэнергетической поверхности позволяет наглядно представить и количественно

оценить особенности распространения фононных мод в наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии.

Для иллюстрации фокусировки фононов В щелочных металлах построим изоэнергетические поверхности всех мод для волновых векторов в плоскостях {100} и {110} (см. рисунок 1.9). Групповые скорости фононов, определяющие перенос энергии, перпендикулярны этим поверхностям. Они определяются выражением (1.26). Как видно из рисунка 1.9, наиболее анизотропной в щелочных кристаллах является медленная t2-мода. В направлении [011] для одной и той же энергии фононов волновые векторы t_2 -моды для кристаллов Na, K, Rb и Cs будут больше, чем в направлении [001], в 2.9, 2.5, 2.8 и 4 раза соответственно. Медленная t_2 -мода играет существенную роль в электрон-фононной релаксации и термоэдс увлечения в щелочных металлах. При одной и той же энергии фононов в кристаллах Na, K, Rb и Cs её волновые векторы оказываются больше, чем для продольных фононов, в 4, 3.9, 4.4 и 6.7 раза, соответственно. Как мы увидим далее, это окажет значительное влияние на анизотропию электронного транспорта в наноструктурах на основе щелочных металлов, а также приведет к доминирующей роли t2-моды в электрон-фононной релаксации и электросопротивлении щелочных металлов при температурах, гораздо меньших температуры Дебая. Её фокусировка характеризуется углами θ_1 - θ_4 . Угол θ_1 определяет направление волнового вектора, для которого вектор групповой параллелен направлению фокусировки. Характерными скорости особенностями на изоэнергетической поверхности t2-моды являются линии нулевой кривизны, в которых происходит переход от выпуклых к вогнутым областям (см. рисунок 1.9a). Углы ± θ_2 задают направления волновых векторов к точкам нулевой кривизны. Углы $\pm \theta_3$ определяют направления групповых скоростей в точках нулевой кривизны, которые имеют максимальное схождение к направлению фокусировки (здесь к [100]) (см. рисунок 1.9). В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают. Поэтому фононы, распространяющиеся в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$, в упруго анизотропных кристаллах будут распространяться в меньшем секторе, определяемом направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ (см. рисунок 1.9). Это дает нам возможность определить относительную плотность состояний фононов t2-моды в областях фокусировки по отношению к изотропной среде.

Следует отметить один эффект, который может найти применение в технических приложениях развитой в настоящей теории фокусировки фононов в монокристаллах щелочных металлов. Как видно из рисунка 1.9, значительно большее значение параметра анизотропии в щелочных металлах приводит не только к существенному увеличению анизотропии спектра квазипоперечных мод, но и качественному изменению фокусировки квазипродольных фононов.



Рисунок 1.9 – Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей (10⁻⁵ с/см) для кристаллов: Na (a, б), K (в, г) и Cs (д, е) (кривые 1, 2, 3) и Rb (кривые 1b, 2b, 3b). Для продольных – кривые 1, быстрых – кривые 2 и медленных поперечных фононов – кривые 3: (a, в, д) для волновых векторов в плоскости грани куба; (б, г, д) для волновых векторов в диагональной плоскости.

Для волновых векторов в плоскостях типа {100} направления групповых скоростей *L*-фононов для всех щелочных металлов близки к направлениям типа [101]. Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей *L*-фононов, приведенные на рисунке 1.9, очень напоминают рисунок 1.8в для случая фокусировки в направлении [101]. Для волновых векторов в плоскостях {100} направления групповых скоростей близки к направлениям типа [101]. Для иллюстрации этого эффекта на рисунке 1.10 мы привели зависимости угла отклонения вектора групповой скорости *L*-фононов от направления [101] для всех волновых векторов в секторе фокусировки. Оценки показали, что для кристаллов Na более 90% фононов с волновыми векторами в плоскости {100} распространяются в направлениях, близких к [101], так, например, для кристаллов K и Cs – 79% и 86%, соответственно. Поэтому для монокристаллов круглого или квадратного сечения с осью [101], фонон, падающий на торцевую плоскость под углом меньше $\pi/2$, будет



Рисунок 1.10 – Угловые зависимости отклонения вектора групповой скорости продольных фононов от направления фокусировки [110] в плоскости грани куба: кривая 1 – для Na, кривая 2 – для Rb, кривая 3 – для Cs и кривая 4 – для K.

распространяться вдоль оси [101] до столкновения с противоположной гранью. Таким образом, монокристаллы щелочных металлов могут быть использованы для изменения направления распространения упругих волн на угол $0 < \kappa \pi/2$. Очевидно, что продольные фононы, исходящие из точечного источника, при попадании на торцевую грань будут распространяться далее вдоль направления [101]. Этот эффект может быть использован для получения плоскопараллельных пучков продольных волн от точечного источника продольных колебаний. С другой стороны, если мы направим плоскопараллельный пучок продольных волн вдоль направления [101], то он будет сфокусирован в физически малом объёме вдоль оси [101]. Отметим, что одной из проблем, требующей дальнейшего исследования, является возможность использования эффекта фокусировки *L*-фононов в щелочных кристаллах для технических приложений. Сравним влияние фокусировки на распространение фононов в металлических и диэлектрических кристаллах. Для диэлектрических кристаллов мы будем пользоваться результатами работ [73-75] (см. также [38]). Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере мод *t*₁ и *t*₂ в кристаллах Si и CaF₂ для волновых векторов, лежащих в плоскостях {100} и {110}.

поверхности. Из рисунка 1.11 видно, что максимальную анизотропию для волновых векторов в плоскости {100} и {110} имеют медленные и быстрые поперечные моды. Однако их анизотропия значительно меньше, чем для щелочных металлов. Поэтому углы $\pm \theta_3$, определяющие направления групповых скоростей в точках нулевой кривизны, существенно меньше, чем в щелочных металлах (сравните рисунок 1.9 и 1.11). Из сравнения видно, что направления фокусировки и дефокусировки в щелочных металлах и кристаллах кремния совпадают, поскольку они относятся к кристаллам с положительной анизотропией упругих модулей. Однако при переходе к кристаллам CaF₂ направления фокусировки и дефокусировки металлах, то, в отличие от квазипоперечных мод, изоэнергетические поверхности для них во всех рассмотренных нами кубических кристаллах не содержат областей с отрицательной кривизной и являются всюду выпуклыми (см. рисунок 1.12). Зависимости групповых скоростей от направлений волнового вектора фононов для них является



Рисунок 1.11 – Схема, иллюстрирующая фокусировку медленных и быстрых поперечных мод в кристаллах Si (a), (б) и CaF₂ (в), (г) для сечений изоэнергетической поверхности плоскостью XZ (a), (в) для моды t_2 и диагональной плоскостью для мод t_1 и t_2 (б), (г). Стрелками изображены волновые вектора внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её.


Рисунок 1.12 – Фокусировки продольных мод в кристаллах Si и CaF₂. Изоэнергетические поверхности для плоскостей (a) {100} и (б) {110} в кристаллах Si (кривые 1) и CaF₂ (кривые 2) в модели анизотропного континуума. Штриховыми стрелками изображены волновые вектора и сплошными стрелками – соответствующие им групповые скорости фононов.

однозначной функцией углов для кристаллов обоих типов. Эффект фокусировки выражен слабее и происходит менее драматическим образом, чем для квазипоперечных мод (см. рисунки 1.9 и 1.11). Как видно из этих рисунков, направления фокусировки *L*-фононов для щелочных металлов типа (Na, K, Rb, Cs) и диэлектрических кристаллов типа (Si), относящихся к первому типу, совпадают. Однако при переходе к кристаллам второго типа (CaF₂) они становятся направлениями дефокусировки.

Итак, наиболее интересной особенностью распространения фононов в щелочных металлах является влияние фокусировки на распространение продольных фононов. Для волновых векторов фононов в плоскостях {100} направления их групповых скоростей близки к направлениям [101]. Оценки показали, что для кристаллов Na, Cs и K более 90%, 86% и 79% фононов, соответственно, с волновыми векторами в плоскости {100} распространяются в направлениях [101]. Этот эффект может быть использован для получения плоско параллельных пучков продольных волн от точечного источника продольных колебаний, так и для других технических приложений.

1.3 Влияние фокусировки на плотность фононных состояний в щелочных металлах

Для качественной оценки влияния фокусировки на плотность фононных состоянии (ПФС) для полупроводниковых и диэлектрических кристаллов в работах [38, 73, 75] предложен простой способ. Он заключается в выделении областей фокусировки и дефокусировки и введение средних значений ПФС для каждой из областей (см. [38]). Для нахождения характерных углов $\theta_i^{t2\{100\}}$

37

определим направление групповой скорости $\theta_g^{\lambda}(\theta, \varphi)$ через угловые координаты волнового вектора θ и φ . Из условия $(\mathbf{V}_g^{\lambda}\mathbf{q}) = V_g^{\lambda}q\cos(\alpha^{\lambda}(\theta, \varphi))$ определим угол между групповой скоростью и волновым вектором

$$\alpha^{\lambda}(\theta,\varphi) = \pm \arccos\left(1 + \left(S_{\theta}^{\lambda}\right)^{2} + \left(S_{\varphi}^{\lambda}\right)^{2}\right)^{-0.5}.$$
(1.29)

Рассмотрим случаи волновых векторов, лежащих в плоскостях {100} и {110}, для которых углы $\varphi=0$ и $\pi/4$, и компонента групповой скорости $S_{\varphi}^{\lambda}=0$. Тогда

$$\alpha^{\lambda}(\theta) = \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta) \,. \tag{1.30}$$

В системе координат по ребрам куба угол между осью Z и направлением групповой скорости равен:

$$\theta_g^{\lambda} = \theta + \alpha^{\lambda} = \theta + \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta).$$
(1.31)

Из последнего равенства следует, что знак компоненты $S_{\theta}^{\lambda}(\theta)$ определяет, в какую сторону будет отклоняться вектор групповой скорости относительно волнового вектора фонона. Поскольку в изотропной среде направление групповой скорости фонона совпадает с направлением волнового вектора фонона, то мы получаем возможность рассматривать модель изотропной среды как систему сравнения при анализе влияния фокусировки фононов на изменение плотности фононных состояний в упруго анизотропных кристаллах. На рисунке 1.13 приведена схема расчета характерных углов $\theta_i^{i2(100)}$. Угол $\theta_1^{i2(100)}$ определяется из условия $\theta_g^{\lambda} = 0$:

$$\theta_1 + \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta_1) = 0. \tag{1.32}$$



Рисунок 1.13 – Схема расчета характерных углов θ_1 , θ_2 , θ_3 и θ_4 для t_2 -моды в кристаллах кремния (а) и калия (б): кривая 1 – функция $S_{\theta}^{t^2}(\theta,0)$, кривая 2 – функция $\alpha^{t^2}(\theta,0)$, кривая 3 – функция $\theta_g^{t^2}(\theta,0)$, кривая 4 – функция $\theta_g^{t^2} = \theta$.

Для нахождения углов θ_2 и θ_3 необходимо построить функцию $\theta_g^{t^2}(\theta, 0)$ (кривая 3)

$$\theta_g^{\lambda}(\theta) = \theta + \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta) \tag{1.33}$$

и найти её минимум. Положение минимума $_{d\theta_{g}^{\prime 2}(\theta,0)/d\theta}|_{_{\theta=\theta_{2}}=0}$ определяет точку нулевой кривизны с углом θ_{2} , а значение функции $\theta_{g}^{\lambda}(\theta_{2})$ даёт величину угла θ_{3} (см. рисунок 1.13).

$$\theta_3 = \theta_2 + \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta_2). \tag{1.34}$$

После этого построим векторы групповых скоростей $\mathbf{V}_{g}^{\prime 2}(\pm \theta_{2}^{\prime 2})$ и определим углы «схождения» групповых скоростей $\pm \theta_{3}$. Угол $2\theta_{3}$ определяет область фокусировки фононов. Очевидно, что величину сектора волновых векторов, соответствующих фокусировке фононов, будут определять групповые скорости $\mathbf{V}_{g}^{\prime 2}(\pm \theta_{4}^{\prime 2})$, коллинеарные направлениям $\mathbf{V}_{g}^{\prime 2}$ в точках нулевой кривизны, а именно $-\theta_{4}^{\prime 2} \le \theta \le \theta_{4}^{\prime 2}$ (см. рисунок 1.13). Уравнение для определения угла θ_{4}^{λ} имеет вид: $\theta_{3}^{\lambda} = \theta_{g}^{\lambda}(\theta_{4}^{\lambda}) = \theta_{4}^{\lambda} + \operatorname{arctg} S_{\theta}^{\lambda}(\theta_{4}^{\lambda})$. (1.35)

Для графического определения угла θ_4 на рисунке 1.13 проводим горизонтальную линию на высоте θ_3 до пересечения с кривой 3. Точка пересечения $\theta_g^{\lambda}(\theta_4^{\lambda}) = \theta_3^{\lambda}$ даст нам угол θ_4^{λ} , который определяет сектор фокусировки $-\theta_4^{\lambda} \le \theta \le \theta_4^{\lambda}$ в пространстве волновых векторов. Таким образом, расходящийся сектор волновых векторов $-\theta_4^{\lambda} \le \theta \le \theta_4^{\lambda}$ в плоскости {100} для моды t_2 превращается в сходящийся к направлению [001] сектор групповых скоростей $-\theta_3^{\lambda} \le \theta_g \le \theta_3^{\lambda}$. Поскольку в изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, то фононы, распространяющиеся в ней в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$, в упруго анизотропных кристаллах будут распространяться в меньшем секторе, определяемом направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности $-\theta_3 \le \theta \le \theta \le \theta_3$ (см. рисунок 1.11). Это дает нам возможность определить относительную ПФС λ -моды в областях фокусировки $n_{eff}^{\lambda(100)}$ по отношению к изотропной среде (см. [38]):

$$n_{FI}^{t2\{100\}} = N_F^{t2\{100\}} / N_{Iso} = \theta_4^{t2\{100\}} / \theta_3^{t2\{100\}}.$$
(1.36)

Аналогично можно определить среднюю ПФС в области дефокусировки фононов $n_{DI}^{\lambda\{100\}}$. Для поперечных мод она будет меньше, чем N_{Iso} , в отношении

$$n_{DI}^{\lambda\{100\}} = N_D^{\lambda\{100\}} / N_{Iso} = \left(\pi - 4\theta_4^{\lambda\{100\}}\right) / \left(\pi - 4\theta_3^{\lambda\{100\}}\right).$$
(1.37)

Из формул (1.36) и (1.37) получим отношения средних ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов, которые характеризуют её анизотропию (см. [38, 73, 75]):

$$n_{FD}^{\lambda\{100\}} = N_F^{\lambda\{100\}} / N_D^{\lambda\{100\}} = \theta_4^{\lambda\{100\}} \left(\pi - 4\theta_3^{\lambda\{100\}}\right) / \left[\left(\pi - 4\theta_4^{\lambda\{100\}}\right) \theta_3^{\lambda\{100\}} \right]$$
(1.38)

В таблице 1.3 приведены значения углов, характерные для фокусировки *L*-фононов в плоскостях $\{100\}$ для щелочных металлов, и средние значения ПФС в областях фокусировки и дефокусировки. Углы $\theta_3^{L\{100\}}$ и $\theta_4^{L\{100\}}$ определены из условия $A^L(\theta,0)>1$ для коэффициентов усиления потока *L*-фононов. Как видно из таблицы 1.3, среднее значение ПФС *L*-фононов в областях фокусировки для кристалла Na более чем на порядок величины превышает значения в модели изотропной среды, а для кристаллов K и Cs в 5 и 7 раз, соответственно. Относительно областей дефокусировки ПФС в кристаллах Na, K и Cs они увеличиваются в 80, 10 и 20 раз, соответственно.

Таблица 1.3 – Значения углов $\theta_i^{L\{100\}}$ и средняя ПФС для *L*-фононов в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости {100} в щелочных металлах.

I тип	$ heta_3^{L\{100\}}$	$ heta_4^{L\{100\}}$	$n_{FI}^{L\{100\}}$	$n_{DI}^{L\{100\}}$	$n_{FD}^{L\{100\}}$
Na	3.02°	38.1°	12.6	0.16	78.8
Li	3.59°	30.1°	8.4	0.36	23.3
K	5.39°	25.5°	4.7	0.49	9.65
Rb	4.9°	27.2°	5.5	0.44	12.6
Cs	3.93°	28.4°	7.2	0.40	17.9

Рассмотрим изменение углового распределения ПФС квазипоперечных мод в щелочных металлах для волновых векторов в плоскости {100}. В таблице 1.4 приведены значения углов, характеризующих фокусировку *t*₂-моды, и средние значения ПФС в областях фокусировки и

Таблица 1.4 – Значения углов $\rho_i^{\lambda_{100}}$ и средняя плотность состояний в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости {100} для медленной t_2 -моды в щелочных металлах Li, Na, K, Rb, Cs.

I тип	<i>k</i> -1	$\theta_1^{t2\{100\}}$	$\theta_2^{t2\{100\}}$	$\theta_3^{t2\{100\}}$	$ extsf{ heta}_{4}^{t2\{100\}}$	$n_{FI}^{t2\{100\}}$	$n_{DI}^{t2\{100\}}$	$n_{FD}^{t2\{100\}}$
Κ	2.28	41.2°	14.06°	36°	44.39°	1.23	0.068	18.2
Li	4.83	42.2°	13.97°	39.4°	44.68°	1.13	0.057	19.9
Na	45.1	41.3°	13.8°	40.46°	44.69°	1.11	0.068	16.2
Rb	3.8	41.8°	16.5°	37.7°	44.58°	1.18	0.058	20.6
Cs	4.2	43.67°	18.9°	41.53°	44.9°	1.08	0.029	37.5



Рисунок 1.14 – Угловое распределение ПФС $n_{FI}^{\lambda\{100\}}$ в кристаллах Na, K (a) и Rb, Cs (б) для волновых векторов в плоскости {100}: кривые 1, 3 – для K и Rb, кривые 2, 4 – для Na и Cs. Кривые 1, 2 для t_2 -моды, кривые 3, 4 – для продольных фононов.

дефокусировки. Как видно из рисунка 1.14, значительное увеличение параметра анизотропии в кристаллах Na и K по сравнению с Si приводит не к увеличению ПФС t_2 -моды областях фокусировки относительно изотропной среды, а к уменьшению параметра $n_{Fl}^{t2(100)}$. Интервал сектора фокусировки возрастает, однако параметр $n_{Fl}^{t2(100)}$ в нем уменьшается более чем в 3 раза для K, по сравнению с ПФС для t_2 -моды в Si. При этом для Na и K он становится всего лишь на 11 и 23% больше, чем в модели изотропной среды (таблица 1.4). В противоположность этому в областях дефокусировки ПФС оказывается на порядок меньше, чем в кремнии. Поэтому коэффициенты $n_{FD}^{t2(100)}$ во всех щелочных металлах значительно возрастают и становятся больше, чем в диэлектрических кристаллах (сравните таблицы 1.3 и 1.4). Как видно из таблицы 1.4, нет прямой корреляции между параметром анизотропии k-1 и коэффициентом $n_{FD}^{t2(100)}$ для щелочных металлов: минимальные значения коэффициента $n_{FD}^{t2(100)}$ достигаются для кристаллов Na, которые имеют максимальную величину параметра анизотропии k-1, а максимальное значение коэффициента $n_{FD}^{t2(100)}$

Для иллюстрации особенностей фокусировки фононов в щелочных металлах на рисунке 1.14 приведены угловые зависимости ПФС в кристаллах Na, K, Rb и Cs для волновых векторов в

плоскости {100}. Как видно из рисунка, максимальное значение коэффициент $n_{FI}^{L\{100\}}$ *L*-фононов достигается для кристаллов Na, а минимальное – для K в направлениях, близких к [110]. Что касается диэлектрических кристаллов первого типа, то для медленной t_2 -моды минимальное значение параметр $n_{FI}^{t2(100)} = 1.98$ имеет место для GaN, а максимальное значение $n_{FI}^{t2(100)} = 4.98$ – для MgO. Как видно из таблицы 1.5, для диэлектрических кристаллов также нет прямой корреляции между коэффициентом $n_{FI}^{t2(100)}$ и параметром k-1. Скорее всего имеет место обратная зависимость: чем больше параметр k-1, тем меньше коэффициент $n_{FI}^{t2(100)}$. Такая же

Таблица 1.5 – Рассчитанные значения углов $\theta_i^{\lambda\{100\}}$ и средняя плотность состояний в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости {100} для моды t_2 в кристаллах первого типа и моды t_1 в кристаллах второго типа.

I тип	<i>k</i> -1	$\theta_1^{t2\{100\}}$	$\theta_2^{t2\{100\}}$	$\theta_3^{t2\{100\}}$	$\theta_4^{t2\{100\}}$	$n_{FI}^{t2\{100\}}$	$n_{DI}^{t2\{100\}}$	$n_{FD}^{t2\{100\}}$
GaN	1.275	33.0°	14.3°	19.9°	39.4°	1.98	0.22	8.9
GaAs	0.90	28.6°	13.8°	12.0°	34.4°	2.86	0.32	8.9
Ge	0.87	25.7°	12.2°	9.4°	31.4°	3.33	0.38	8.7
GaSb	0.85	28.2°	13.5°	11.9°	34.2°	2.88	0.33	8.8
InSb	0.81	30.9°	14.3°	14.9°	36.7°	2.46	0.28	8.8
LiF	0.78	23.8°	11.7°	7.5°	29.1°	3.90	0.42	9.2
MgO	0.69	21.2°	10.9°	5.2°	25.7°	4.98	0.49	10.2
Si	0.67	23.6°	11.9°	6.8°	28.6°	4.22	0.43	9.9
II тип	<i>k</i> -1	$ heta_1^{t1\{100\}}$	$ extsf{ heta}_2^{t1\{100\}}$	$\theta_3^{t1\{100\}}$	$ heta_4^{t1\{100\}}$	$n_{FI}^{t1\{100\}}$	$n_{DI}^{t1\{100\}}$	$n_{FD}^{t1\{100\}}$
SrF ₂	-0.20	7.8°	4.5°	0.17°	9.0°	51.99	0.80	64.7
CaF ₂	-0.33	25.9°	13.4°	7.8°	31.0°	3.97	0.38	10.5
PbS	-0.466	30.3°	14.2°	14.5°	36.4°	2.51	0.28	8.9
NaCl	-0.48	27.5°	13.2°	11.8°	34.0°	2.87	0.33	8.6

ситуация имеет место в кристаллах второго типа для моды t_1 (см. таблицу 1.5). В области дефокусировки для всех мод ПФС меньше, чем в изотропной среде, поэтому коэффициент $n_{DI}^{t2\{100\}}$ меньше единицы. Так, например для кристаллов Ge и Si получим $n_{DI}^{t2\{100\}} = 0.38$ и 0.43, соответственно. Оценки показывают, что максимальная анизотропия плотности фононных состояний, определяемая отношением ПФС в области фокусировки к области дефокусировки,

для моды t_2 в диэлектрических кристаллах первой группы имеет место для MgO $n_{FD}^{t2\{100\}} = 10.2$, а минимальная - для Ge $n_{FD}^{t2\{100\}} = 8.7$ (см. таблицу 1.5). Как видно из таблицы, для диэлектрических кристаллов также нет прямой корреляции между параметром анизотропии k-1 и коэффициентом $n_{FD}^{t2\{100\}}$. Анализ показывает, что максимальные значения коэффициента $n_{FD}^{t2\{100\}}$ обусловлены малыми значениями углов $\theta_3^{t2\{100\}}$, характеризующих область фокусировки фононов. Этот эффект проявляется и в кристаллах второй группы (см. таблицу 1.5). Отметим, что наличие участков отрицательной кривизны на изоэнергетических поверхностях акустических мод представляет определенные трудности при анализе фокусировки с помощью «фактора усиления» (см., например, [14, 34, 76-78]). Связано это с тем, что, во-первых, «фактор усиления» обращается



Рисунок 1.15 – Угловые зависимости средних плотностей фононных состояний в плоскости $\{100\}$ для моды t_2 в кристаллах Si (1), Ge (2), GaN (3) и быстрой моды t_1 в кристаллах CaF₂ (4) и PbS (5). Штриховая кривая 6 – плотность фононных состояний в модели изотропной среды.

в бесконечность в точках нулевой кривизны, а во-вторых, в областях с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности зависимости групповых скоростей от направления волнового вектора становятся неоднозначной функцией углов (см. рисунок 1.11). Рассмотрим и сравним угловые зависимости средних плотностей фононных состояний в кристаллах первого типа, включая щелочные металлы (см. рисунок 1.15) и полупроводники (Ge, Si), и второго типа (CaF₂, PbS) для волновых векторов в плоскости грани куба. Как видно из рисунка 1.15, области максимумов ПФС в кристаллах первого типа (Ge, Si) соответствуют минимумам в кристаллах второго типа (CaF₂, PbS). Это обусловлено тем, что направлениям фокусировки в кристаллах первого типа. Из приведенных на рисунке 1.15 зависимостей ПФС для кристаллов первого типа видно, что её максимальные значения достигаются для кристалла Si, который имеет минимальное значение параметра анизотропии и угла $2\theta_3^{\prime 2(100)}$, определяющего область фокусировки фононов, а

минимальное значение – для кристалла GaN, который имеет максимальное значение этого параметра. Как мы увидим далее, резкое изменение ПФС при переходе от областей фокусировки к областям дефокусировки приведет к значительному влиянию на анизотропию решеточной теплопроводности, длин пробега фононов, а также термоэдс увлечения в наноструктурах на основе щелочных металлов.

1.4 Коэффициент усиления потока фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии

Рассмотрим и сравним коэффициенты усиления потока фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. При изучении распространения фононных импульсов в упруго анизотропных кристаллах в работах [12-14, 79, 80] была отмечена резкая анизотропия пространственного распределения потока энергии акустических колебаний различных поляризаций. Так, например, в работе [12] было обнаружено, что амплитуды фононных импульсов в кристаллах LiF и KCl сильно зависят от их поляризации и направления распространения. Для кристалла LiF в направлении [100] интенсивность потока поперечных фононов оказалась в 100 раз больше, чем для продольных фононов, тогда как в кристаллах КСІ – наоборот: амплитуда импульса поперечных фононов оказалась в 7 раз меньше, чем для продольных фононов. С другой стороны, для кристаллов LiF в направлении [110] интенсивность потока быстрой поперечной моды превосходила значения для продольной и медленной поперечной моды в 10 и 20 раз, соответственно. Для количественного описания этих эффектов Марис в работе [13] ввел понятие коэффициента усиления потока фононов $A^{\lambda}(\theta, \phi)$, который также известен [13, 76, 81] как «amplification factor». Он воспользовался моделью изотропной среды как системой сравнения и определил коэффициент $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ как отношение потока фононов данной поляризации для выбранного направления волнового вектора к соответствующему потоку в изотропной среде [13]. Однако, как мы увидим далее, дифференциальный характер определения коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ приводит к ряду особенностей, которые затрудняют его использование для интерпретации экспериментальных данных по распространению фононных импульсов в упруго анизотропных кристаллах. А обращение в бесконечность коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$ в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности не позволяет сделать количественных оценок изменения плотности фононных состояний в кристаллах за счет фокусировки фононов. Определим выражение для коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ согласно [13]. Пусть на одной из граней образца находится источник фононов (нагреватель), а на противоположной грани – детектор фононов. Они соединены вектором **R**. В изотропной среде волны, покидающие

источник, будут достигать детектора в случае, если их волновые векторы лежат в телесном угле $\delta\Omega_q$ в окрестности направления **R** (см. рисунок 1.16). В случае анизотропной среды волна с волновым вектором **q** и поляризацией λ достигает центра детектора, если направления групповой скорости лежат в телесном угле $\delta\Omega_V$ в окрестности вектора **R**, т.е. $\mathbf{V}_g^{\lambda} \| \mathbf{R}$. Как видно из рисунка 1.16, этому условию для поперечных мод может удовлетворять не одна волна, а по крайней мере, две или три волны в направлениях волновых векторов, соответствующих областям с отрицательной кривизной на изоэнергетической поверхности. В работе [13] показано, что коэффициент усиления $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$, характеризующий отличие потоков фононов в кристалле и изотропной среде, может быть определен через отношение телесных углов для волновых векторов и групповых скоростей:

$$A^{\lambda}(\theta,\varphi) = \delta\Omega_{q} / \delta\Omega_{V}^{\lambda} \quad . \tag{1.39}$$

Поскольку распределение волновых векторов, в отличие от групповых скоростей, изотропно в кристалле, то плотность потока фононов будет увеличиваться или уменьшаться на величину $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ по отношению к изотропной среде. Поэтому наша задача сводится к вычислению отношения телесного угла в **q**-пространстве к телесному углу в пространстве групповых скоростей. Нетрудно убедиться (см. детали расчета в [38, 48]), что коэффициент усиления $A^{\lambda}(\theta, \phi)$



Рисунок 1.16 – Схематичное изображение телесных углов: (*a*) - $\delta\Omega_q$ в **q**-пространстве и (δ) – $\delta\Omega_V$ в пространстве групповых скоростей.

может быть представлен в виде:

$$A^{\lambda}(\theta,\varphi) = \partial \Omega_{q} / \partial \Omega_{V}^{\lambda} = \frac{1}{\left(V_{g}^{\lambda}\right)^{3} \sin \theta} \left[\left[\frac{\partial \mathbf{V}_{g}^{\lambda}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{V}_{g}^{\lambda}}{\partial \varphi} \right] \cdot \mathbf{V}_{g}^{\lambda} \right].$$
(1.40)

Использование декартовой системы координат является слишком громоздким для анализа коэффициента усиления $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$, поскольку содержит более 300 членов. В работах [82, 83] предложен другой способ вычисления коэффициента усиления через производные углов групповой скорости θ_{v}^{λ} и φ_{v}^{λ} , определяющих направление вектора \mathbf{V}_{g}^{λ} . Этот подход упрощает численный анализ коэффициента усиления, однако остается достаточно громоздким, а его результат не дает замкнутого аналитического выражения для коэффициента усиления. В работе [44] показано, что использование сферической системы координат для векторов групповых скоростей и их производных позволил получить точное аналитическое решение для коэффициента усиления $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$ через угловые компоненты групповой скорости S_{θ}^{λ} , S_{φ}^{λ} и их производные:

$$A^{\lambda}(\theta,\varphi) = \left(\widetilde{V}_{g}^{\lambda}\right)^{3} \left(1 + \left(S_{\theta}^{\lambda}\right)^{2} + \frac{\partial S_{\theta}^{\lambda}}{\partial \theta}\right) \left(1 + S_{\theta}^{\lambda} \frac{\cos\theta}{\sin\theta} + \left(S_{\varphi}^{\lambda}\right)^{2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial S_{\varphi}^{\lambda}}{\partial \varphi}\right) - \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial S_{\theta}^{\lambda}}{\partial \varphi} + S_{\varphi}^{\lambda} \left(S_{\theta}^{\lambda} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)\right)^{2}\right|^{-1} \cdot (1.41)$$

Очевидно, что для модели изотропной среды угловые производные S^{λ}_{θ} , S^{λ}_{φ} равны нулю, а коэффициент усиления равен единице. Для дальнейшего анализа особенностей распространения потока фононов в упруго анизотропных кристаллах мы будем пользоваться аналитическим выражением (1.41) для коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$.

Спектр упругих волн и групповые скорости реальных кристаллов имеют достаточно сложный вид. Рассмотрим более подробно изоэнергетическую поверхность для t_2 -моды (см. рисунок 1.9 для щелочных металлов и рисунок 1.11 для диэлектриков). Выше было показано, что в окрестности направлений [100] в интервале углов $0 \le \theta \le \theta_1$ функция $\theta_s^{r^2}(\theta) < 0$, а при $\theta = \theta_2$ она имеет локальный минимум (см. рисунок 1.13). Углы $\pm \theta_2$ определяют направления волновых векторов к точкам нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности (см. рисунок 1.9 и 1.11). В этих точках происходит переход от выпуклых к вогнутым областям, и её кривизна обращается в ноль. В трехмерном случае множество этих точек образует линии нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности и обратно пропорционален её кривизне в данной точке [13, 38, 44]. Поэтому точки нулевой кривизны математически соответствуют бесконечному потоку фононов от точечного источника тепла вдоль соответствующего направления групповой скорости.

1.5 Анализ угловых зависимостей коэффициента усиления

Рассмотрим влияние фокусировки на угловые зависимости коэффициентов усиления в щелочных металлах, таких как Na, K, Rb и Cs. Сравним их с результатами, полученными в [38] для диэлектрических и полупроводниковых кристаллов. В качестве примера таких кристаллов рассмотрим кремний и CaF₂ (см. рисунок 1.17). В модели изотропной среды коэффициент $A^{\lambda}(\theta,0)=1$. Поэтому интервалы углов, в которых выполняется неравенство $A^{\lambda}(\theta,0)>1$, можно отнести к области фокусировки фононов, а интервалы, в которых выполняется обратное неравенство $A^{\lambda}(\theta,0)<1$ – к области дефокусировки фононов. Очевидно, что в точках нулевой кривизны $\theta = \theta_2^{t^2}$ коэффициент усиления поперечной *t*₂-моды для Si обращается в бесконечность



Рисунок 1.17 – Угловые зависимости коэффициентов усиления $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ в кристаллах Si (a), (б) и CaF₂ (в), (г) для волновых векторов в плоскости грани куба (а), (в) и диагональной плоскости (б), (г). Штриховые линии 1 соответствуют модели изотропной среды, кривые 2 – продольным фононам, кривые 3 – быстрой поперечной моде t_1 , кривые 4 – медленной t_2 -моде.

(см. рисунок 1.17а, кривая 4). Минимального значения он достигает в направлении дефокусировки [110], где для Si $A_{[110]}^{t2} = 0.23$. Быстрая поперечная t_1 -мода в кристаллах Si является изотропной для волновых векторов в плоскости грани куба. Она фокусируется при всех углах, и коэффициент усиления для неё $A_{[110]}^{\prime 1} \approx 5.7$. Однако в кристаллах второго типа CaF₂ изотропной является медленная t₂-мода. Для волновых векторов в плоскости грани куба она дефокусируется при всех углах, и коэффициент усиления для неё $A_{11101}^{t^2} \approx 0.27$. Продольные фононы в кристаллах Si фокусируются и дефокусируются в направлениях [111] и [100], соответственно, и в этих случаях коэффициенты усиления $A_{[111]}^L$ =2.20 и $A_{[100]}^L$ =0.27, соответственно. В направлении [110] для них имеет место локальный максимум фокусировки, и $A_{[110]}^L = 1.42$. В кристалле второго типа CaF₂ коэффициент усиления быстрой поперечной моды в точках нулевой кривизны (при $\theta = \theta_2^{t1}$) на изоэнергетической поверхности обращается в бесконечность (см. рисунок 1.176, кривая 3). Для продольных фононов в направлении [100] имеет место фокусировка и коэффициент усиления $A_{[100]}^L = 3.21$, а в направлении [110] они дефокусируются и коэффициент $A_{[110]}^L = 0.78$. Рассчитаем коэффициенты усиления потока фононов в щелочных кристаллах и сравним с результатами для диэлектрических и полупроводниковых кристаллов. Результаты расчета приведены на рисунке 1.18. В кристаллах калия эффект фокусировки медленной t2-моды для волновых векторов в плоскости {001} проявляется в большей степени, чем в плоскости {011} (см. рисунок 1.18). Для волновых векторов в плоскости грани куба области фокусировки медленной t_2 -моды расположены при углах $0.16 < \theta < 0.51$ и $1.06 < \theta < 1.4$, в которых коэффициент усиления $A^{t2}(\theta, \phi) < 1$, и медленная t_2 -мода дефокусируется (см. рисунок 1.18). Как уже отмечали ранее, в точках нулевой кривизны при $\theta = \theta_2^{\prime 2}$ происходит переход от выпуклых к вогнутым областям и кривизна поверхности обращается в ноль. В этих направлениях ($\theta = \theta_2^{(2)}$) коэффициент усиления t2-моды обращается в бесконечность [13, 38, 44]. В противоположность этому, в плоскости {011} для преобладающего интервала углов доминирует дефокусировка фононов, и $A^{t2}(\theta, \pi/4) < 1$. Однако в узких интервалах углов $0.21 < \theta < 0.24$ и $1.05 < \theta < 1.10$ для фактора усиления имеют место небольшие пики, где коэффициент усиления $A^{t2}(\theta, \pi/4) > 1$ (см. рисунок 1.18a, кривая 4). Следует отметить, что для всех щелочных металлов быстрая t_1 -мода для волновых векторов в плоскости {001} дефокусируется. В противоположность этому для продольных фононов в плоскости {001} имеются широкие области углов, определяющие интервалы фокусировки. Для кристаллов Rb и Cs угловые зависимости коэффициентов усиления потока фононов для всех мод количественно близки (см. рисунок 1.18д, е). Для них в плоскости {001} для углов 0.16< θ <0.53 и



Рисунок 1.18 – Угловые зависимости коэффициентов усиления $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ в кристаллах - Na (a), (б); К (в) (г); Rb и Cs (д) (е), для волновых векторов в плоскости грани куба (a), (в), (д); в диагональной плоскости (б), (г), (е). Штриховые линии 1 соответствуют модели изотропной среды, кривые 2 –продольным фононам, кривые 3 – быстрой поперечной моде t_1 , кривые 4 – медленной t_2 -моде.

49

1.04< θ <1.4 фактор усиления $A^{t^2}(\theta,0)>1$, а в достаточно широких интервалах 0.25< θ <0.38 и 1.19< θ <1.32 в окрестности углов $\theta_2^{t^2}$ он гораздо больше 1 и обращается в бесконечность при $\theta = \theta_2^{t^2} = 0.31$.

Как уже отмечали, все щелочные и благородные металлы относятся к кристаллам первого типа (см. таблицу 1.1), однако для волновых векторов в плоскости грани куба коэффициенты усиления быстрой t_1 -моды для них, в отличие от кристаллов кремния, оказываются заметно меньше единицы. Анализ коэффициентов усиления для быстрой t_1 -моды в кристаллах первого типа и медленной t_2 -моды в кристаллах второго типа, проведенный в [38], позволил объяснить эту особенность. Для этого фазовую скорость быстрой t_1 -моды в кристаллах первого типа следует разложить вблизи плоскости грани куба при $\varphi << 1$:

$$S^{\prime 1}(\theta, \varphi) \approx \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 - \frac{\delta}{2} \varphi^2 \cdot \sin^2 \theta \right), \qquad \delta = \left[\frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \right] \frac{(k-1)(2k+1)}{(k+1)}.$$
(1.42)

Как следует из выражения (1.41), при $\varphi \to 0$ вклад в коэффициент усиления t_1 -моды дает только вторая производная фазовой скорости $\partial^2 S^{t1} / \partial \varphi^2$:

$$A^{\prime 1}(\theta,0) = \left| 1 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 S^{\prime 1}}{\partial \varphi^2} \sqrt{\frac{\rho}{c_{44}}} \right|^{-1} = \left| \frac{1}{1-\delta} \right|.$$
(1.43)

Для большинства полупроводниковых кристаллов первого типа значения параметра δ лежат в интервале $0 \le \delta \le 2$, и коэффициент усиления быстрой поперечной моды может значительно превосходить единицу. Однако для щелочных и благородных кристаллов первого типа Na, K, Li, Au, Ag и Cu параметр $\delta > 2$, и коэффициент усиления быстрой поперечной моды оказывается меньше единицы (см. таблицу 1.6). Как видно из таблицы, корреляция между коэффициентом $A^{tl}(\theta,0)$ и параметром анизотропии k-1 отсутствует. Из рассмотренных кристаллов первого типа коэффициент усиления достигает максимального значения для MgO ($A^{tl}(\theta,0)\approx 16.11$), для которого параметр анизотропии k-1=0.7 мало отличается от значения для HgSe (см. таблицу 1.6 в [38]). Минимальное значение коэффициент $A^{tl}(\theta,0)=0.4$ имеет щелочной

Таблица 1.6 – Значения параметров *k*-1, δ и коэффициентов усиления $A^{tl}(\theta, 0)$, $A^{tl}(\theta, \pi/4)$ для быстрой поперечной моды в кубических кристаллах первого типа.

Кристалл	Fe	Cu	Ag	Au	GaAs	Si	Na	Li	K	Cs	Rb
<i>k</i> -1	1.15	1.19	0.85	0.38	0.9	0.67	45.1	4.83	2.28	3.18	2.77
δ	1.91	2.32	2.19	2.05	1.49	1.17	3.47	3.31	2.98	3.41	3.12
$A^{tl}(\theta, 0)$	1.09	0.76	0.86	0.94	2.04	5.74	0.40	0.43	0.51	0.42	0.47
$A^{tl}(\theta, \pi/4)$	0.72	0.87	0.79	0.74		0.62	2.21	2.36	1.57	4.16	1.91

металл Na, у которого параметр анизотропии упругой энергии имеет максимальное значение: k-1=45.1. В кристаллах второго типа (k-1<0) для волновых векторов в плоскости грани куба фазовая скорость медленной t_2 -моды принимает минимальные значения. Для нее фазовая скорость при φ <<1 определяется уравнением (1.42), а коэффициент усиления $A^{t2}(\theta, 0)$ –выражением (1.43). Поскольку во всех кристаллах второго типа параметр δ < 0, то коэффициент усиления для них оказывается меньше единицы (см. таблицу 1.7 и рисунок 1.17). Как видно из таблицы 1.7, для кристаллов второго типа значения коэффициентов усиления обратно пропорциональны параметру анизотропии. Максимальное значение коэффициент усиления $A_{100}^{t2} \approx 0.86$ принимает для кристалла YIG, для которого параметр анизотропии имеет минимальное значение: k-1=-0.04. Минимальное значение коэффициент $A_{100}^{t2} \approx 0.19$ достигает для наиболее анизотропного кристалла KCl с параметром анизотропии k-1=-0.63. Таким образом, в коэффициентах усиления медленной t_2 -моды для всех кристаллов второго типа преобладают эффекты дефокусировки фононов, поэтому для волновых векторов в плоскости грани куба коэффициенты $A_{100}^{t2} < 1$.

Следует отметить ещё одну особенность коэффициента усиления быстрой t_1 -моды $A^{t1}(\theta, \varphi)$ в окрестности направления [100]: он претерпевает конечный разрыв. Причем для кристаллов Si и щелочных металлов, которые относятся к первому типу кубических кристаллов, этот разрыв имеет обратный характер. При $\theta \rightarrow 0$ и $\varphi=0$ для кристаллов Si коэффициент $A^{t1}(0,0)\approx 4.4$ значительно больше единицы, однако при $\pi/4$ он меньше единицы: $A^{t1}(0, \pi/4)=0.72$ (см. рисунок 1.17). В противоположность этому для щелочных металлов при $\theta \rightarrow 0$ и $\varphi=0$ коэффициенты $A^{t1}(0,0)$ значительно меньше единицы, а при $\pi/4$ – коэффициент $A^{t1}(0, \pi/4)$ заметно больше единицы (см. рисунок 1.18). Как видно из сравнения рисунков 1.7 и 1.18, ситуация для медленной t_2 -моды качественно изменяется. Для всех щелочных металлов коэффициенты $A^{t2}(0,0)$ и $A^{t2}(0,\pi/4)$ остаются значительно меньше единицы, тогда как для кристаллов Si коэффициент $A^{t2}(0,0) > 1$, $A^{t2}(0, \pi/4) < 1$. Для объяснения этих особенностей требуется более детальный анализ поведения коэффициента $A^{t2}(\theta,\varphi)$, исходя из формул (1.41), чем это сделано в разделе 3. Дело в том, что при

Таблица 1.7 -	- Значения пар	аметров k-1,	δ и коэф	официентов	усиления	<i>А</i> ^{<i>t</i>2} в	кристаллах
второго типа д	іля медленной і	топеречной мо	оды и вол	новых векто	ров в плос	кости	грани куба.

	KCl	NaCl	PbS	CaF ₂	SrF ₂	YIG
<i>k</i> -1	-0.63	-0.48	-0.47	-0.33	-0.20	-0.04
δ	-4.29	-2.12	-2.59	-1.80	-0.88	-0.17
A^{t2}	0.19	0.32	0.28	0.36	0.53	0.86

анализе плотности фононных состояний и рассмотрении сечений изоэнергетической поверхности для $\varphi=0$ и $\pi/4$ в разделе 1.3, мы зафиксировали угол φ и учитывали только производные фазовой скорости по θ . Тогда как при вычислении коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$ учитываются производные по обоим углам. Коэффициент усиления характеризует изоэнергетическую поверхность и обратно пропорционален её гауссовой кривизне $A \sim 1/K$ [28]. Как показано в работе [34], в зависимости от её кривизны возможны различные типы особенностей: (а) типа «седло», (б) типа «вогнутый лепесток» Тип особенностей на трехмерной поверхности определяется её гауссовой кривизной K [28]. Она может быть представлена в виде произведения главных кривизн поверхности: $K=K_1 \cdot K_2$. В работе [34] показано, что при K<0 (K_1 и K_2 имеют разные знаки) поверхность имеет особенность типа седловой точки; если оба значения K_1 и K_2 положительны, то поверхность выпуклая.

Для того чтобы проанализировать тип возникающих особенностей в окрестности направления [100] для различных значений угла φ , разложим выражение для фазовой скорости медленной t_2 -моды при $\theta <<1$. Тогда получим:

$$S^{\prime 2}(\theta,\varphi) \approx \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 - \theta^2 \Delta_{t2}(\varphi)\right), \quad \Delta_{t2}(\varphi) = \frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}} (k - 1) \left[\sqrt{(1 + 2k)\cos^2 2\varphi + k^2} + k + 1\right]$$
(1.44)

Для плоскости грани куба вторые производные по θ и φ имеют разные знаки: $\partial^2 S'^2 / \partial \theta^2 < 0$, $\partial^2 S'^2 / \partial \varphi^2 > 0$. Поэтому в окрестности грани куба при $\theta <<1$ в кристаллах Si реализуется особенность типа седловой точки. Для диагональной плоскости вторая производная $\partial^2 S'^2 / \partial \theta^2$ остается отрицательной, а $\partial^2 S'^2 / \partial \varphi^2$ становится отрицательной. Поэтому в окрестности диагональной плоскости поверхность становится вогнутой («вогнутый лепесток»).

В предельном случае $\theta << 1$ из выражения (1.41) следует, что зависимость коэффициента усиления медленной поперечной моды от угла φ , которую при $\varphi=0$ и $\varphi=\pi/4$ можно представить в виде произведения двух множителей:

$$A^{\prime 2}(0^{+},\varphi) \approx \frac{1}{K_{1}K_{2}}, \quad K_{1} = 1 - 2\Delta_{t2}(\varphi), \qquad K_{2} = 1 - 2\Delta_{t2}(\varphi) - \Delta_{t2}''(\varphi), \tag{1.45}$$

$$\Delta_{t2}''(\varphi) = \frac{d^2 \Delta_{t2}(\varphi)}{d\varphi^2} = -\frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}} (k - 1)(1 + 2k) \times \left\{ \frac{4\cos 4\varphi}{\sqrt{(1 + 2k)\cos^2 2\varphi + k^2}} + \frac{(1 + 2k)\sin^2 4\varphi}{\left(\sqrt{(1 + 2k)\cos^2 2\varphi + k^2}\right)^3} \right\}.$$

Для углов $\phi=0$ и $\phi=\pi/4$ имеем:

$$\Delta_{t2}(0) = \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}} (k^2 - 1), \ \Delta_{t2}''(0) = -\frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \frac{(k - 1)(1 + 2k)}{(k + 1)},$$
(1.46)

$$\Delta_{t2}''(\pi/4) = \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \frac{(k-1)(1+2k)}{k}, \ \Delta_{t2}(\pi/4) = \frac{c_{11} - c_{44}}{4c_{44}} (k-1)(2k+1) \ . \tag{1.47}$$

Для кристаллов первого типа с малой упругой анизотропией (таких как YAG) изоэнергетическая поверхность t_2 -моды является всюду выпуклой, а обе главные кривизны поверхности K_1 и K_2 положительны (см. таблицу 1.8). Из условий K_1 >0, K_2 >0 и выражений (1.47) следуют неравенства, в которых изоэнергетическая поверхность остается выпуклой (см. рисунок 1.19):

$$1 < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2k}{(k-1)(k+2)(2k+1)} .$$
(1.48)

Как следует из (1.48), эта область ограничена кривой 1:

$$c_{11} / c_{44} = 1 + 2k / \{ (k-1)(k+2)(2k+1) \}.$$
(1.49)

Отметим, что для кристаллов второго типа (k-1 \leq 0) величины K_1 и K_2 положительны. Поэтому поверхности постоянной энергии поперечных фононов для них при θ <<1 являются выпуклыми(см. таблицу 1.8). С увеличением параметра анизотропии k-1 для кристаллов первого типа мы пересекаем кривую 1 и попадаем во вторую область. Для неё при θ << 1 в окрестности плоскости грани куба поверхность постоянной энергии медленных поперечных фононов является выпуклой (K_1 >0 и K_2 >0), а в окрестности диагональной плоскости реализуется особенность типа седловой точки: (K_1 >0, K_2 <0). Из системы неравенств $K_1(0,0)>0$ и $K_2(0,0)>0$ при φ =0 и $K_1(0,\pi/4)>0$, $K_2(0,\pi/4)<0$ при $\varphi=\pi/4$ для второй области получим:

$$1 + \frac{2k}{(k-1)(k+2)(2k+1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{1}{k^2 - 1}.$$
(1.50)

Она ограничена кривыми 1 и 2, последняя определяется выражением $c_{11}/c_{44}=1+1/(k^2-1)$. Из рассмотренных кристаллов в эту область параметров попадает алмаз (см. рисунок 1.19). В третьей области главные кривизны имеют разные знаки в обеих плоскостях: в плоскости грани куба $K_1<0$, $K_2>0$, а в диагональной плоскости $K_1>0$, $K_2<0$. Поэтому для обеих плоскостей на изоэнергетической поверхности образуются особенности типа седловых точек. Эта область расположена между кривыми 2 и 3 и определяется неравенствами:

$$1 + \frac{1}{k^2 - 1} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2}{(k - 1)(2k + 1)}$$
(1.51)

Однако ни один из рассмотренных в таблице 1.8 кристаллов в третью область не попал. Дальнейшее увеличение параметра анизотропии k-1 приводит к появлению следующих особенностей на изоэнергетической поверхности при $\theta <<1$: в окрестности плоскости грани куба для моды t_2 -моды появляется особенность типа седловой точки ($K_1(0,0)<0$ и $K_2(0,0)>0$), а в окрестности диагональной плоскости поверхность постоянной энергии становится вогнутой ($K_1(0,\pi/4)<0$ и $K_2(0,\pi/4)<0$, «вогнутый лепесток»). Эти неравенства определяют четвертую

Таблица 1.8 – Значения коэффициентов усиления $A^{t2}(0^+,0)$ и $A^{t2}(0^+,\pi/4)$ и параметров характеризующих кривизну изоэнергетических поверхностей для кристаллов первого и второго типа при $\theta << 1$.

	$c_{11}^{}/c_{44}^{}$	$1/\widetilde{K}_1^{t2}(0,0)$	$1/\widetilde{K}_{2}^{t2}(0,0)$	$1/\widetilde{K}_1^{t2}(0,\tfrac{\pi}{4})$	$1/\widetilde{K}_2^{t2}(0,\tfrac{\pi}{4})$	$A^{t^2}(0,0)$	$A^{t2}(0,\tfrac{\pi}{4})$
Fe	1.99	-0.39	-1.49	0.50	-0.21	0.57	0.10
Cu	2.23	-0.3	-1.03	-0.38	-0.17	0.28	0.061
Au	4.44	-0.48	-28.6	-0.7	-0.2	9.45	0.14
Ag	2.57	-0.36	-1.69	-0.47	-0.18	0.78	0.094
GaAs	2.00	-0.62	-8.31	-0.86	-0.29	5.16	0.25
InSb	2.23	-0.56	-6.37	-0.77	-0.26	3.56	0.20
MgO	1.94	-1.32	3.26	-2.33	-0.47	4.32	1.10
Ge	1.92	-0.77	50	-1.11	-0.34	38.5	0.38
LiF	1.92	-0.94	7.14	-1.47	-0.39	6.74	0.58
Na	1.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.0002	0.0002
Li	1.37	-0.09	-0.13	-0.1	-0.07	0.011	0.007
K	1.74	-0.16	-0.31	-0.19	-0.11	0.05	0.02
Cs	1.6	-0.11	0.19	-0.13	-0.083	0.021	0.11
Rb	1.63	-0.14	-0.24	-0.16	-0.096	0.033	0.015
GaN	1.89	-0.37	-1.25	-0.47	-0.2	0.46	0.096
Si	2.09	-1.09	4.0	-1.79	-0.41	4.36	0.72
Алмаз	1.87	6.25	1.41	2.94	-1.67	8.80	4.90
YAG	2.89	1.11	1.03	1.08	1.29	1.14	1.40
	c_{11}/c_{44}	$1/\widetilde{K}_1^{t1}(0,0)$	$1/\widetilde{K}_{2}^{t1}(0,0)$	$1/\widetilde{K}_1^{t1}(0,\tfrac{\pi}{4})$	$1/\widetilde{K}_2^{t1}(0,\tfrac{\pi}{4})$	$A^{t1}(0,0)$	$A^{t1}\left(0, \frac{\pi}{4}\right)$
YIG	3.52	0.84	0.95	0.87	0.69	0.8	0.6
SrF ₂	4.0	0.48	0.82	0.56	0.26	0.39	0.15
CaF ₂	4.74	0.33	0.75	0.41	0.15	0.25	0.06
PbS	5.12	0.25	0.74	0.33	0.1	0.19	0.03
NaCl	4.33	0.29	0.78	0.38	0.11	0.23	0.04
KCl	6.37	0.18	0.75	0.25	0.05	0.13	0.01



Рисунок 1.19 – Графики зависимости c_{11}/c_{44} от параметра k-1, определяющие пять областей с различной кривизной изоэнергетических поверхностей для медленных поперечных фононов в кубических кристаллах первого типа. Области I, II, III, IV, V ограничены кривыми 1, 2, 3, 4, 5, уравнения для которых задаются неравенствами (1.48), (1.50)-(1.53), соответственно. Сплошные кривые – результаты нашего анализа, штриховые кривые – результаты расчета Эвери [83]. Символами обозначены значения параметров для кристаллов первого типа.

область, ограниченную кривыми 3 и 4 (см. рисунок 1.19):

$$1 + \frac{2}{(k-1)(2k+1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{k+1}{k^2(k-1)}.$$
(1.52)

В неё входят такие кристаллы, как Si, MgO, Ge, LiF (см. рисунок 1.19). При дальнейшем увеличении параметра анизотропии k-1 мы пересекаем кривую (4) и попадаем в пятую область, в которой обе кривизны K_1 и K_2 становятся отрицательными. Поэтому поверхность постоянной энергии для t_2 -моды при θ <<1 становится вогнутой («вогнутый лепесток») для произвольного угла φ (см. таблицу 1.8). Из выражений (1.46) и условия $c_{11}>c_{44}$ для пятой области получаем соотношения, определяющие кривые 4 и 5:

$$1 + \frac{k+1}{k^2(k-1)} < \frac{c_{11}}{c_{44}} < 1 + \frac{2}{k-1}.$$
(1.53)

В пятую область попали все щелочные и благородные металлы Na, Li, K, Rb, Cs и Cu, Au, Ag, a также кристаллы Fe, GaN с максимальной анизотропией упругой энергией (см. рисунок 1.19). В работе [83] Эвери провел численный анализ кривизны изоэнергетических поверхностей для кубических кристаллов в координатах отношений упругих модулей c_{11}/c_{44} и c_{12}/c_{44} без введения параметра анизотропии k-1. Он получил соотношения для модулей упругости, которые разделяют кристаллы с различным типом изоэнергетических поверхностей. Как видно из рисунка 1.19, в координатах c11/c44 и k-1 результаты, полученные нами в [38] (сплошные линии), согласуются с результатами анализа, проведенного в [83] (штриховые линии). В таблицу 1.8 и на рисунок 1.19 мы добавили щелочные и благородные металлы в отличие от [38]. Для устранения расходимости коэффициента $A^{t^2}(\theta, \phi)$ в окрестности направлений к точкам нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях Марис в [13] усреднил фононный поток по детектору в виде круга и получил средние значения коэффициента усиления. В работах [13, 76-78, 82, 85] усреднение коэффициента $A^{t2}(\theta, \phi)$ для поперечных фононов проведено по прямоугольным и круглым детекторам и приемникам для симметричных направлений в кристаллах. На примере кристалла GaAs было показано, что результаты усреднения зависят от размеров и формы областей усреднения и могут изменяться в несколько раз.

Итак, нами проанализированы особенности угловых зависимостей коэффициентов усиления потока фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. Исследованы зависимости типов кривизны изоэнергетических поверхностей акустических мод в щелочных и благородных металлах от величины и знака параметров анизотропии. Подводя итог анализу влияния фокусировки на распространение фононных мод в упруго анизотропных кристаллах, можно утверждать, что подход, основанный на рассмотрении коэффициента усиления [76-78, 80-83, 85], не позволяет пока сделать количественные оценки плотности состояний квазипоперечных мод в окрестности точек нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях. Однако он находит широкое применение при анализе баллистического транспорта фононов и построения фононных изображений [76-78, 80-83, 85]. С другой стороны, в работах [73, 75] нами предложен простой и наглядный способ оценки средних плотностей фононных состояний для областей фокусировки и дефокусировки фононов, в котором изотропная среда также использована в качестве системы сравнения. Он дает достаточно грубую оценку влияния фокусировки на ПФС, поскольку не учитывает зависимость фазовых скоростей от угла φ . Однако развитый в работах [73-75] метод оценки средних ПФС дает хорошее согласие угловых зависимостей ПФС и длин свободного пробега: сектора максимумов обоих величин соответствуют областям фокусировки, а минимумов – областям дефокусировки фононов. Поэтому в дальнейшем этот метод может быть использован для качественной оценки влияния фокусировки поперечных фононов на электронный и фононный транспорт.

1.6 Выводы

Основные результаты главы 1 могут быть сформулированы следующим образом:

1. Анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах показал, что в соответствии со знаком параметра анизотропии k-1 они могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной k-1>0 (тип I) и отрицательной k-1<0 (тип II) анизотропией упругих модулей второго порядка. Для кристаллов одного типа направления фокусировки и дефокусировки колебательных мод совпадают, тогда в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа.

2. Анализ влияния фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний показал, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения ПФС достигаются в областях фокусировки, а минимальные - в областях дефокусировки фононов. Поэтому направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями минимумов в кристаллах второго типа. Проведено сравнение результатов для металлических и диэлектрических кристаллов кубической симметрии. Определены области углов, соответствующие фокусировке и дефокусировке фононов.

3. Расчет угловых зависимостей спектров и векторов поляризации фононов показал, что в щелочных и благородных металлах они качественно не отличаются от зависимостей для диэлектрических кристаллов первой группы. Однако анизотропия спектра для них существенно выше, чем для кристаллов типа Ge и Si. Вектора поляризации медленной *t*₂-моды для них имеют аномально большую продольную компоненту по сравнению с полупроводниковыми кристаллами: для кристаллов Na, Li и K она достигает 70, 60 и 30%, соответственно. Это приведет к значительно большему влиянию медленной *t*₂-моды на электрон-фононную релаксацию и термоэдс увлечения в щелочных и благородных металлах. Наиболее заметным эффектом для щелочных металлов является влияние фокусировки на распространение продольных фононов. Оценки показали, что для кристаллов Na, Cs и K более 90, 86 и 79% фононов, соответственно, с волновыми векторами в плоскости {100} распространяются в направлениях [101]. Этот эффект может быть использован для получения плоскопараллельных пучков продольных волн от точечного источника продольных колебаний, а также и для других технических приложений.

4. Рассчитаны коэффициенты усиления потока фононов и проведено их сравнение для металлических и диэлектрических кристаллов. Проанализированы зависимости типов кривизны изоэнергетических поверхностей акустических мод в щелочных и благородных металлах от величины и знака параметров анизотропии.

Основные результаты, приведенные в Главе 1, опубликованы в работах [A1, A21, A25, A26, A27].

2 Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии

В настоящей главе рассмотрим релаксацию фононов и фононный транспорт в упруго анизотропных кристаллах. При достаточно низких температурах, когда хотя бы в одном из направлений длина свободного пробега фононов оказывается больше или сравнимой с характерным размером образца, то значения теплопроводности определяются характером взаимодействия фононов с поверхностью. Такую ситуацию, когда доминирующим механизмом релаксации фононов является диффузное рассеяние на границах, принято называть режимом граничного рассеяния или кнудсеновским течением фононного газа. Ниже проанализируем фокусировки фононов кнудсеновское влияние на течение фононного газа В монокристаллических образцах кремния в рамках теории Казимира – МакКарди [8,15]. Казимир [8] в модели изотропной среды расчитал теплопроводность диэлектрического стержня бесконечной длины. Он предположил, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Теория Казимира [8] была обобщена в работе [15] на случай упруго анизотропных кристаллов. К предположению Казимира авторы добавили ещё два: (1) поток тепла и распределение температур однородны по длине образца; (2) предполагается наличие плоскости зеркальной симметрии, перпендикулярной оси образца. Последнее предположение о наличии плоскости зеркальной симметрии не является критичным. Дело в том, что плоскость, перпендикулярная направлению [111], не является плоскостью зеркальной симметрии. Однако для этого направления рассчитанные значения длин пробега фононов согласуются с экспериментальными данными с той же погрешностью, как и для других направлений [15]. Авторы [15] не смогли получить аналитические выражения для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины и проанализировать температурные зависимости теплопроводности для монокристаллических образцов кремния с различными направлениями теплового потока относительно кристаллографических осей.

Эта задача была решена в наших работах [36-37]: получены выражения для скоростей релаксации и длин свободного пробега фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением. В них определены скорости релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах в виде кусочно-гладких

функций для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами образцов. Показано, что в образцах с квадратным и круглым сечением длины свободного пробега фононов для каждой моды достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод. Эти результаты изложены в приложении А.

Экспериментальные исследования [15] показали, что при низких температурах, когда длины свободного пробега фононов оказываются больше поперечного размера образца, фокусировка фононов приводит к двум эффектам МакКарди в теплопроводности объёмных кристаллов Si. Первым эффектом является зависимость теплопроводности образцов с квадратным сечением от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей. Вторым эффектом является зависимость теплопроводности образцов Si с прямоугольным сечением от ориентации широких граней. Для двух исследованных в [15] образцов, имеющих одинаковые геометрические параметры и направление градиента температуры [110], теплопроводность образца Si с широкой гранью {001} и узкой {110} при низких температурах на 33% выше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {001}.

В работе [39] показано, что для корректного учета этих эффектов при расчете скоростей релаксации фононов на границах монокристаллических образцов следует ввести два ориентационных параметра, которые учитывают зависимости релаксационных характеристик от направления теплового потока [I] и ориентации широкой грани образца {J} относительно кристаллографических осей. Поэтому в отличие от изотропной среды, при расчете кинетических характеристик монокристаллических образцов мы должны учесть их зависимость от ориентационных параметров

$$\kappa(T) \Longrightarrow \kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)$$
 и $\Lambda \Longrightarrow \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}$.

Далее показано, что ориентационные параметры: направление теплового потока $[I(\psi)]$ и плоскость $\{J\}$, в которой изменяется угол ψ , могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Предложенный метод учета фокусировки фононов является актуальным, поскольку ранее в работах, посвященных исследованию фононного транспорта как в объёмных монокристаллах, так и в наноструктурах [5-7, 33, 86-88] эти эффекты не учитывали.

В параграфе 2.1 рассмотрено влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на решеточную теплопроводность кубических кристаллов в трехмодовой модели Каллавея с учетом анизотропии упругой энергии. В параграфе 2.2 развит метод учета фокусировки фононов при расчете температурных зависимостей теплопроводности монокристаллических образцов. В параграфе 2.3 показано, что использование скоростей релаксации фононов на границах [36, 37] позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образца. В параграфе 2.4 дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии.

2.1 Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и решеточная теплопроводность кубических кристаллов

Рассмотрим влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на решеточную теплопроводность кубических кристаллов с учетом фокусировки фононов. Система кинетических уравнений для неравновесных функций распределения фононов N_q^{λ} в трехмодовой модели Каллавея имеет вид [89-92]:

$$\mathbf{V}_{g}^{\lambda}(q) \cdot \nabla_{r} N_{q}^{\lambda} = -(N_{q}^{\lambda} - N_{q\lambda}^{(0)}) \nu_{R}^{\lambda} - \left(N_{q}^{\lambda} - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_{\lambda})\right) \nu_{N}^{\lambda}.$$

$$(2.1)$$

Здесь $v_N^{\lambda}(q)$ и $v_R^{\lambda}(q)$ - скорости релаксации фононов в нормальных (N-процессах) и резистивных процессах рассеяния. Резистивные процессы рассеяния приводят к релаксации импульса фононной системы. К ним относится рассеяние фононов на фононах в процессах переброса $v_U^{\lambda}(q)$, на дефектах - $v_{iso}^{\lambda}(q)$ и границах образца $v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$, поэтому $v_{R[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = v_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} + v_{iso}^{\lambda}(q) + v_U^{\lambda}(q)$. Роль N-процессов фонон-фононного рассеяния в теории решеточной теплопроводности достаточно хорошо изучена [29,31,89-94]. В этих процессах импульс фононов, участвующих в столкновениях, сохраняется. Поэтому они не дают непосредственного вклада в релаксацию импульса фононов и, соответственно, в теплосопротивление. Однако они перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение, которое описывается смещенной функцией Планка [89-92]:

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_{\lambda}) = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{q\lambda} - \hbar\mathbf{q}\mathbf{u}_{\lambda}}{k_{B}T}\right) - 1\right)^{-1} \approx N_{q\lambda}^{0} + \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{u}_{\lambda}}{k_{B}T} N_{q\lambda}^{0} (N_{q\lambda}^{0} + 1),$$
(2.2)

где $N_{q\lambda}^0$ - функция Планка. В этом случае неравновесная система фононов описывается девятью параметрами: скоростями релаксации в нормальных и резистивных процессах рассеяния, а также средними скоростями дрейфа \mathbf{u}_{λ} для каждой ветви фононного спектра. Учет особой роли N-процессов необходим в условиях, когда частота релаксации фононов $V_N^{\lambda}(q)$ будет больше либо сравнима с частотой релаксации в резистивных процессах рассеяния [89-92]. В противоположном

случае их можно учитывать аддитивно с резистивными процессами рассеяния, как это сделано в [95].

Представим функцию распределения фононов в виде суммы функции Планка и неравновесной добавки $g_{\lambda}(\mathbf{q})$, тогда из уравнения (3.1) получим

$$g_{\lambda}(\mathbf{q}) = -\frac{N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0}+1)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \frac{\hbar \omega_{q}^{\lambda}}{k_{B}T^{2}} (\mathbf{V}_{g}^{\lambda} \nabla_{r}T) + \frac{\hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_{\lambda}}{k_{B}T} N_{q\lambda}^{0} (N_{q\lambda}^{0}+1) \frac{\nu_{\lambda}^{\lambda}(q)}{\nu^{\lambda}(q)} = g_{\lambda}^{dif}(\mathbf{q}) + g_{\lambda}^{dr}(\mathbf{q}) .$$

$$(2.3)$$

Первый член в выражении (2.3) определяется диффузионным движением фононов под действием градиента температуры. Второй член определяется дрейфовым движением фононов и обусловлен нормальными процессами фонон-фононного рассеяния. Для нахождения скоростей дрейфа \mathbf{u}_{λ} система кинетических уравнений (2.1) должна быть дополнена уравнением баланса импульса фононов, которое получается путем умножения уравнения (2.1) на вектор импульса фононов $\hbar \mathbf{q}$ и суммирования по всем векторам \mathbf{q} .

$$\frac{1}{V}\sum_{q,\lambda}\hbar\mathbf{q}\,\boldsymbol{v}_{N}^{\lambda}(q)\frac{N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0}+1)}{k_{B}T\boldsymbol{v}^{\lambda}(q)}\left[\frac{\hbar\omega_{q}^{\lambda}}{T}(\mathbf{V}_{g}^{\lambda}\nabla_{r}T)+\hbar(\mathbf{q}\mathbf{u}_{\lambda})\boldsymbol{v}_{R}^{\lambda}(q)\right]=0.$$
(2.4)

В работе [92] показано, что решение уравнения (2.4) может быть найдено для двух предельных случаев. (1) Если в N-процессах доминируют механизмы релаксации с перераспределением импульса между фононами различных поляризаций, то они стремятся установить одинаковую скорость дрейфа для всех фононов. В этом случае скорость дрейфа $\mathbf{u}^{(\lambda)} = \mathbf{u}^{(1)}$ должна быть одинаковой для всех поляризаций. (2) Если импульс фононов перераспределяется только внутри каждой колебательной ветви, то фононы каждой моды релаксируют независимо, и мы возвращаемся фактически к исходной одномодовой модели Каллавея [89]. Этот вариант релаксации рассмотрен в работе [93] и получил название обобщенной модели Каллавея. В этом случае скорости дрейфа будут различными для фононов различных поляризаций $\mathbf{u}_L^{(2)} \neq \mathbf{u}_t^{(2)}$.

К первому типу N-процессов относятся механизмы релаксации Херринга [68] и Ландау-Румера [96], а также ряд других процессов. В механизме Херринга [68] слияние продольного фонона с медленным поперечным фононом (*ST*) порождает быстрый фонон (*FT*) ($L_1 + ST_2 \rightarrow FT_3$):

$$\boldsymbol{\nu}_N^L \approx \boldsymbol{B}_{LTT} \boldsymbol{T}^3 \boldsymbol{\omega}_L^2 \tag{2.5}$$

Согласно [29, 31, 92-95] основным механизмом релаксации поперечных фононов в N-процессах рассеяния является механизм Ландау-Румера [96], в котором слияние поперечного и продольного фононов порождает продольный фонон ($T_1 + L_2 \rightarrow L_3$)

$$\boldsymbol{v}_N^t \approx \boldsymbol{B}_{TLL} \boldsymbol{T}^4 \boldsymbol{\varpi}_t \,. \tag{2.6}$$

Этот вариант релаксации фононов в N-процессах рассеяния и его роль в теплопроводности

были проанализированы в работе [92]. Саймонс в работе [97] показал, что N-процессы второго типа ($L_1 + L_2 \rightarrow L_3$, $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$) в изотропных средах могут происходить только при учете затухания фононных состояний, причем в них могут принимать участие только коллинеарные фононы. Однако в работах [70,98] показано, что учет кубической анизотропии приводит к выполнению закона сохранения энергии в механизмах релаксации с участием поперечных фононов (*TTT*), и эти механизмы в длинноволновом приближении вносят значительно больший вклад в релаксацию поперечных фононов, чем механизм Ландау-Румера. Для механизма *TTT* скорость релаксации V_N^t определяется также выражением типа (2.6), но с коэффициентом B_{TTT}^N вместо B_{TLL}^N . Итак, в первом варианте N-процессов скорость дрейфа не зависит от поляризации фононов, а во втором случае закон сохранения импульса выполняется для каждой из ветвей фононного спектра.

Заметим, что в модели изотропной среды направления групповой и фазовой скорости совпадают, поэтому диффузионное и дрейфовое слагаемые в функции $g_{\lambda}(\mathbf{q})$ могут быть объединены и введена эффективная частота релаксации фононов [92]:

$$g_{\lambda}(\mathbf{q}) = -\frac{N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0}+1)}{\tilde{v}_{ph}^{\lambda}(q)} \frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{k_{B}T^{2}} (\mathbf{v}_{q}^{\lambda}\nabla T), \qquad \tilde{v}_{ph}^{\lambda(1,2)}(q) = v_{ph}^{\lambda}(q) \left(1 + \frac{v_{N}^{\lambda}(q)}{(S^{\lambda}(\theta,\varphi))^{2}} B^{(1,2)}(T)\right)^{-1}.$$
(2.7)

При учете анизотропии спектра фононов эти направления не совпадают. Прямой расчет $g_{\lambda}(\mathbf{q})$ и скоростей $\mathbf{u}^{(1,2)}$ для обоих вариантов с учетом фокусировки дает:

$$g_{\lambda}^{(1,2)}(\mathbf{q}) = -k_{B} \frac{N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0}+1)}{k_{B}T\nu^{\lambda}(q)} \left(\frac{\hbar\omega_{q}^{\lambda}}{k_{B}T}\right) \left\{ (\mathbf{V}_{g}^{\lambda}\nabla_{r}T) + \left(\left(\frac{\mathbf{q}}{q}\right)\nabla_{r}T\right) \frac{\nu_{N}^{\lambda}(q)}{(S^{\lambda}(\theta,\varphi))} B^{(1,2)}(T) \right\} = g_{\lambda}^{dif}(\mathbf{q}) + g_{\lambda}^{dr}(\mathbf{q}),$$

$$\mathbf{u}^{(1,2)} = -k_{B}\nabla_{r}T B^{(1,2)}(T) / k_{B}T.$$
(2.8)

Коэффициенты $B^{(1,2)}(T)$ при учете дисперсии тепловых фононов имеют вид [41]:

$$\mathbf{B}^{(1)}(T) = \sum_{\lambda} \Psi_{N}^{\lambda} / \sum_{\lambda} \Psi_{NR}^{\lambda}, \quad \mathbf{B}^{(2)}(T) = \Psi_{N}^{\lambda} / \Psi_{NR}^{\lambda}, \quad (2.9)$$

$$\Psi_{N}^{\lambda} = 3 \int_{-1}^{1} \cos \theta d(\cos \theta) \int_{0}^{2\pi} d\varphi \left(y\right)^{4} \int_{0}^{1} \frac{V_{gz}^{\lambda} z^{\lambda} x^{3}}{\left(sh(z^{\lambda}/2)\right)^{2}} \frac{v_{N}^{\lambda}}{v^{\lambda}} dx, \quad \Psi_{NR}^{\lambda} = \int_{-1}^{1} d(\cos \theta) \int_{0}^{2\pi} d\varphi \left(y\right)^{5} \int_{0}^{1} \frac{x^{4}}{\left(sh(z^{\lambda}/2)\right)^{2}} \frac{v_{N}^{\lambda} v_{R}^{\lambda}}{v^{\lambda}} dx, \quad x = \frac{q}{q_{\max}(\theta, \varphi)}, \quad y(T, \theta, \varphi) = \frac{q_{\max}(\theta, \varphi)}{q_{T}}, \quad q_{T} = \frac{k_{B}T}{\hbar}, \quad z^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_{q}^{\lambda}(x, \theta, \varphi)}{k_{B}T} \cdot$$

Максимальный волновой вектор $q_{\max}(\theta, \phi)$ в гранецентрированной кубической решетке (ГЦК) определен выражением:

$$q_{1}(\theta,\varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_{1}|}, q_{2}(\theta,\varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_{2}|}, q_{3}(\theta,\varphi) = \frac{q_{\max}^{[001]}}{|n_{3}|}, q_{4}(\theta,\varphi) = \frac{3/2 \, q_{\max}^{[001]}}{|n_{1}| + |n_{2}| + |n_{3}|}, \qquad (2.10)$$

$$q_{\max}(\theta,\varphi) = \min \{q_{1}(\theta,\varphi), q_{2}(\theta,\varphi), q_{3}(\theta,\varphi), q_{4}(\theta,\varphi)\},$$

где *a* – постоянная решетки, *n*₁, *n*₂, *n*₃ – компоненты единичного волнового вектора **n**. Итак, неравновесные функции распределения фононов в трехмодовой модели Каллавея могут быть представлены в виде аддитивной суммы диффузионного и дрейфового движения фононов.

2.2 Фокусировка фононов и решеточная теплопроводность диэлектрических кристаллов

В отличие от ранее выполненных исследований теплопроводности в модели изотропной среды [29, 31, 89-92] при анализе фононного транспорта в кубических кристаллах мы учитываем фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности от направления теплового потока [$I(\psi)$] и ориентации широкой грани образца относительно осей кристалла {J}. В трехмодовой модели Каллавея теплопроводность можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного $\kappa_{dif[I(\psi)]}^{(J)}$ и дрейфового $\kappa_{dr[I(\psi)]}^{(J)}$ вкладов [41]:

$$\kappa_{dif_{[I(\psi)]}}^{\{J\}}(T) = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, y^3 \int_{0}^{1} \frac{\left(V_{g^3}\right)^2 z_{\lambda}^2 x^2}{v_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} (sh(z_{\lambda}/2))^2} dx \,, \tag{2.11}$$

$$\kappa_{dr[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(T), \quad B_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = \sum_{\lambda} \Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} / \sum_{\lambda} \Psi_{NR[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}, \quad (2.12)$$

$$\Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = 3 \int_{-1}^{1} \cos\theta d(\cos\theta) \int_{0}^{2\pi} d\varphi \ y^{4} \int_{0}^{1} \frac{V_{gz}^{\lambda} x^{3} z_{\lambda}}{(sh(z_{\lambda}/2))^{2}} \frac{v_{N}^{\lambda}}{v_{[I(\psi)]}^{\lambda\{I\}}} dx \ , \quad \Psi_{NR[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_{0}^{2\pi} d\varphi y^{5} \int_{0}^{1} \frac{x^{4}}{(sh(z_{\lambda}/2))^{2}} \frac{v_{N}^{\lambda} v_{R[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}}{v_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}} dx \ .$$

Здесь V_{g3}^{λ} и V_{gz}^{λ} - проекции групповой скорости на направление градиента температуры и ось Z, соответственно, $v_{[J(\psi)]}^{\lambda\{I\}} = v_{[J(\psi)]R}^{\lambda\{I\}}(q) + v_N^{\lambda}(q)$ – полная скорость релаксации фононов. Скорости релаксации фононов в резистивных $v_{[I(\psi)]R}^{\lambda\{J\}}$ и нормальных $v_N^{\lambda}(q)$ процессах релаксации определены в разделе 2.3. Резистивные процессы рассеяния приводят к диффузионному вкладу в теплопроводность, а нормальные процессы фонон-фононного рассеяния обеспечивают дрейфовый вклад в теплопроводность.

Проанализируем особенности фононного транспорта в образцах длины *L*, имеющих прямоугольное сечение со сторонами *D* (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Для образцов с квадратным сечением $\mu = 1$. Для учета влияния фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности монокристаллических образцов достаточно выразить ориентационные параметры через компоненты групповой скорости. Этими параметрами являются направление потока тепла [*I*(ψ)]



Рисунок 2.1 – Схема, иллюстрирующая изменение угла ψ при вращении градиента температуры: (а) - в плоскости грани куба ZY ({J}={100}) и (б) - в диагональной плоскости ({J}={110}). V_{g1}^{λ} , V_{g2}^{λ} и V_{g3}^{λ} - компоненты групповой скорости.

и ориентация плоскости $\{J\}$, в которой угол ψ отсчитывается от оси Z. Для этого рассмотрим вращение потока тепла в двух симметричных плоскостях: (1) широкая грань образца совпадает с плоскостью грани куба YZ $\{J\}$ ={100}, (2) широкая грань образца совпадает с диагональной плоскостью $\{J\}$ ={110} (см. рисунок 2.1). Определим систему координат, связанную с образцом: ось «3» направим вдоль оси образца, которая совпадает с направлением теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно широкой грани образца или одной из граней для образцов с квадратным сечением. Она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно узкой грани образца. Учтем, что спектр фононов определен в системе координат по ребрам куба. Тогда компоненты групповой скорости фононов в принятой системе координат для рассматриваемых случаев могут быть представлены в виде:

(1)
$$V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos \psi + V_{gz}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda},$$
 (2.13a)

(2)
$$V_{g3}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right)\sin\psi/\sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda}\cos\psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right)\cos\psi/\sqrt{2} - V_{gz}^{\lambda}\sin\psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda}\right)/\sqrt{2},$$
 (2.136)

Из рисунка 2.1 видно, что для сечения кубического кристалла $\{J\}$ зависимость направления потока тепла от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^{λ} . Проекция компоненты V_{g1}^{λ} не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения. Она определяет плоскости $\{J\}$ (широкую грань образца). Компонента V_{g2}^{λ} зависит от угла ψ и определяет

ориентацию двух других граней образца. Для исследованных в работе [19] образцов с прямоугольным сечением имеем: первый случай, когда широкая грань образца совпадает с {100}, узкая - с {110}, а градиент температур направлен вдоль [110], что соответствует

выражению (2.13а) с углом $\psi = \pi/4$ (см. рисунок 2.1а). Тогда для компонент V_{gi}^{λ} имеем

$$V_{g3}^{\lambda} = (-V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda})/\sqrt{2}, \quad V_{g2}^{\lambda} = (V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda})/\sqrt{2}, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}.$$
(2.14a)

Второй случай, когда широкая грань совпадает с плоскостью {110}, а узкая с {100}, и градиент температур направлен вдоль [110], соответствует выражению (2.13б) с углом $\psi = \pi/2$. Тогда для компонент V_{vi}^{λ} имеем

$$V_{g3}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right)/\sqrt{2}, \quad V_{g2}^{\lambda} = -V_{gz}^{\lambda}, \quad V_{g1}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda}\right)/\sqrt{2}.$$
(2.146)

Итак, мы показали, что ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Компоненты групповой скорости фононов, необходимые для расчета температурных зависимостей теплопроводности, в декартовой системе координат имеют вид

$$V_{gx}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) = S_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi) \{V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi + S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta\cos\varphi - S_{\varphi}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\varphi\},\$$

$$V_{gy}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) = S_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi) \{V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta\sin\varphi + S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta\sin\varphi + S_{\varphi}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\varphi\},\$$

$$V_{gz}^{\lambda}(x,\theta,\varphi) = S_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi) \{V_{n}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\cos\theta - S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)\sin\theta\}.$$
(2.15)

Функции $V_n^{\lambda}(x,\theta,\varphi)$, $S_{\theta}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)$ и $S_{\varphi}^{\lambda}(x,\theta,\varphi)$ являются компонентами групповой скорости фононов в сферической системе координат, нормированные на фазовую скорость (см. [99]). Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость, а также скорости релаксации уже зависят не только от углов ψ, θ, φ , но и от приведенного волнового вектора фонона *x*, т.е. $\mathbf{V}_g^{\lambda} = \mathbf{V}_g^{\lambda}(x,\psi,\theta,\varphi)$ и $V_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = V_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi)$.

Влияние фокусировки на теплопроводность определяется рассеянием фононов на границах. Скорости релаксации фононов в этом механизме выражаются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами $k_0 = L/2D$ и $\mu = W/D$. Для потока тепла в направлении [$I(\psi)$], где угол ψ отсчитывается от оси Z в плоскости {J}, она может быть представлена в следующем виде [39]:

$$\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi) = \frac{\left|V_{g3}^{\lambda}\right|}{k_{0}D} \left\{ 1 - \frac{k_{0}}{2} \frac{\left(V_{g2}^{\lambda}\right| + \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right|\right)}{\mu \left|V_{g3}^{\lambda}\right|} + \frac{(k_{0})^{2}}{3} \frac{\left|V_{g1}^{\lambda}\right| \left|V_{g2}^{\lambda}\right|}{\mu \left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}} \right\}^{-1}, \quad k_{0} = \frac{L}{2D}$$
(2.16)

при выполнении неравенств $\mu \left| V_{g1}^{\lambda} \right| > \left| V_{g2}^{\lambda} \right|$ $u \quad \left| V_{g3}^{\lambda} / V_{g1}^{\lambda} \right| \ge k_0$ или $\mu \left| V_{g1}^{\lambda} \right| < \left| V_{g2}^{\lambda} \right|$ и $\left| V_{g3}^{\lambda} / V_{g2}^{\lambda} \right| \ge k_0 / \mu$.

При выполнении противоположных неравенств имеем:

$$v_{B[I]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi) = v_{B\infty[I]}^{\lambda\{J\}}(x,\theta,\varphi) = \begin{cases} \frac{6\mu}{D} \frac{\left(V_{g_1}^{\lambda}\right)^2}{\left(3\mu|V_{g_1}| - |V_{g_2}|\right)}, \text{если} |V_{g_2}| < \mu|V_{g_1}|u|V_{g_3}^{\lambda}/V_{g_1}^{\lambda}| < k_0; \\ \frac{6}{\mu D} \frac{\left(V_{g_2}^{\lambda}\right)^2}{\left(3|V_{g_2}^{\lambda}| - \mu|V_{g_1}|\right)}, \text{если} |V_{g_2}| > \mu|V_{g_1}|u|V_{g_3}^{\lambda}/V_{g_2}^{\lambda}| < \frac{k_0}{\mu}. \end{cases}$$
(2.17)

Зависимости теплопроводности от направления градиента температуры $[I(\psi)]$ и ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла $\{J\}$ определяются компонентами групповой скорости фононов. Они входят непосредственно в выражения для теплопроводности и скорости релаксации $V_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$.

Выражение для скорости релаксации фононов на изотопическом беспорядке в кубических кристаллах, согласно [100-103], имеет вид:

$$\nu_{iso}(q_1,\lambda_1) = \frac{\pi}{6} g V_0 \omega_{q_1\lambda_1}^2 D(\omega_{q_1\lambda_1}), \quad D(\omega_{q_1\lambda_1}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}_2\lambda_2} \delta(\omega_{q_1\lambda_1} - \omega_{q_2\lambda_2}).$$
(2.18)

Здесь V_0 – объем, приходящийся на один атом, g – фактор изотопического беспорядка $g = \sum_i C_i (\Delta M_i / \overline{M})^2$, где $\Delta M = M_i - \overline{M}$, M_i – масса *i*-го изотопа, $\overline{M} = \sum_i C_i M_i$ – средняя масса изотопной композиции, а C_i – концентрация *i*-го изотопа, $D(\omega)$ – плотность фононных состояний, V – нормировочный объем. В модели анизотропного континуума выражение (2.18) можно представить в виде [103]:

$$\nu_{iso}^{\lambda} \approx A_{iso} \left(T \cdot z_{\lambda} \right)^{4}, \qquad A_{iso}^{\lambda} = \frac{gV_{0}}{12\pi} \left(k_{B} / \hbar \right)^{4} \left\langle \left(S_{0}^{\lambda} \right)^{-3} \right\rangle, \ \left\langle \left(S_{0}^{\lambda} \right)^{-3} \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \left(S_{0}^{\lambda} (\theta, \varphi) \right)^{-3}, \tag{2.19}$$

$$A_{iso} = \begin{cases} A_{iso}^{L} + A_{iso}^{t1} + A_{iso}^{t2} = 0.46, \text{если } \omega \le \omega_{\max}^{t2}; \\ A_{iso}^{L} + A_{iso}^{t1} = 0.21, \text{если } \omega_{\max}^{t2} < \omega \le \omega_{\max}^{t1}; \\ A_{iso}^{L} = 0.04, \text{если } \omega_{\max}^{t1} < \omega \le \omega_{\max}^{L}; \\ 0, \quad \text{если } \omega > \omega_{\max}^{L}. \end{cases}$$

Параметр изотопического беспорядка $g = 2.01 \cdot 10^{-4}$ для Si^{nat} с природным составом изотопов. При учете дисперсии фононов плотность фононных состояний $D(\omega)$ может быть определена из фононного спектра.

Выражение для скорости релаксации фононов в процессах переброса, согласно [29, 31, 68, 89, 92-95], имеет вид

$$\nu_U^{\lambda} = A_U^{\lambda} \cdot z_{\lambda}^2 \cdot T^3 \cdot \exp\left(-\frac{C_U^{\lambda}}{T}\right) \,. \tag{2.20}$$

Параметры ангармонического рассеяния A_v^{λ} , C_v^{λ} для скоростей релаксаций фононов в процессах переброса являются подгоночными параметрами. Они определятся из сопоставления результатов расчета температурнных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными. Согласно общепринятым представлениям [29, 31, 95], основными механизмами N-процессов рассеяния в кристаллах Si являются механизмы релаксации Херринга [68] для продольных фононов и механизм Ландау-Румера [96] для поперечных фононов (см. формулы (2.5) и (2.6)). В этих процессах импульс фононов перераспределяется между различными колебательными ветвями, поэтому мы будем пользоваться первым вариантом N-процессов рассеяния для нахождения скоростей дрейфа (см. формулу (2.8)). Из сопоставления результатов расчета температурнных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными [15] получены параметры, определяющие скорости релаксации фононов в ангармонических процессах фонон-фононного рассеяния (таблица 2.1).

Таблица 2.1 – Параметры, определяющие скорости релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния для кристаллов Si, $A_{iso} = 0.46 \text{ K}^{-4} \text{ c}^{-1}$.

A_N^L , K ⁻⁵ c ⁻¹	A_N^t , K ⁻⁵ c ⁻¹	A_{u}^{L} , K ⁻³ c ⁻¹	A_{u}^{t} , K ⁻³ c ⁻¹	C_{u}^{L} , K	C_u^t , K
0.8	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^3$	$0.70 \cdot 10^3$	310	98

Как видно из таблицы 2.1 частота релаксации поперечных фононов в N-процессах на два порядка меньше, чем для продольных. Нетрудно убедиться, что во всей температурной области для поперечных фононов выполняется неравенство $v_N^t(q) \ll v_R^t(q)$ и их вклад в теплопроводность определяется диффузионным движением. Для продольных фононов отношение скоростей релаксации $v_N^L/v_R^L < 1$ в интервале температур 1<*T*<12 К меньше единицы, однако при более высоких температурах оно оказывается больше единицы. Поэтому для них необходимо оценить вклад дрейфового движения фононов в теплопроводность аналогично работе [92].

2.3 Анализ температурных зависимостей теплопроводности для образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями

Ниже приведены результаты расчёта теплопроводности $\kappa(T)$, согласно формулам (2.10)-(2.20), для образцов кремния конечной длины с квадратным и прямоугольным сечениями, исследованных в работе [15]. Для граничного рассеяния подгоночные параметры не



Рисунок 2.2 – Температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si с квадратным сечением (L=2.9 см, D=0.293 см) для направления [100] при учете следующих механизмов релаксации фононов: (кривая 1) – учет граничного рассеяния, кривая 2 – учет граничного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке, кривая 3 – учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и нормальных процессов фонон-фононного рассеяния, кривая 4 – учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и процессов фонон-фононного рассеяния, кривая 5 – учет всех механизмов релаксации фононов, символы – экспериментальные значения [15].

использовались. Подгонку результатов осуществляли вариацией параметров ангармонических процессов рассеяния для того, чтобы добиться наилучшего совпадения результатов расчёта к(T) и экспериментальных данных в области максимума к(T). Расчетные параметры, полученные с использованием результатов работ [89, 92-95, 104], приведены в таблице 2.1. Прежде всего рассмотрим влияние различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si для параметров, приведенных в таблице 2.1. Для этого возьмем образец с квадратным поперечным сечением [15] (D=0.293 см, L=2.9 см) и градиентом температуры вдоль направления [100]. При самых низких температурах при учете граничного рассеяния ($v^{\lambda} = v_{B}^{\lambda}$) теплопроводность следует зависимости $\kappa(T) \sim T^{3}$ (см. рисунок 2.2, кривая 2). В низкотемпературной области (T=3 K) рассчитанные значения теплопроводности оказались на 4-8% выше экспериментальных значений. Для объяснения этого расхождения в работах [39,



Рисунок 2.3 – Температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния с квадратным сечением (*L*=2.9 см, *D*=0.293 см) для симметричных направлений градиента температуры: кривая 1 - для направления [100], кривая 2 - для направления [110] и кривая 3 - для направления [111]. Символы – экспериментальные значения [19].

41] была использована концепция дефектного поверхностного слоя, предложенная в работах [105-107]. Однако в работах [36, 99] не учитывали изотопическое рассеяние, вклад которого при T=3 К составляет 5%. Как видно из рисунка 2.2 (кривая 2), учет изотопического и граничного рассеяния ($v^{\lambda} = v_{B}^{\lambda} + v_{iso}^{\lambda}$) позволил согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными в интервале температур от 3 до 15 К в пределах погрешности эксперимента без использования подгоночных параметров. При температурах выше 15 К уже становятся существенными N-процессы фонон-фононного рассеяния и процессы переброса (см. рисунок 2.2, кривые 3 и 4). Полный учет всех процессов рассеяния с подгоночными параметрами, приведенными в таблице 2.1, позволяет согласовать результаты расчета с экспериментом [15] во всем измеренном интервале температур вплоть до 40 К (см. рисунок 2.2, кривая 5). Следует отметить, что главную роль в загибе температурной зависимости теплопроводности играют процессы переброса (сравните кривые 3 и 5 на рисунке 2.2). На рисунке 2.3 представлены температурные зависимости теплопроводности трех одинаковых образцов кремния с квадратным поперечным сечением для симметричных направлений теплового потока, рассчитанные с использованием вычисленных нами времен релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах.

Как видно из рисунка 2.3, развитая нами теория корректно описывает анизотропию и температурные зависимости теплопроводности для образцов кремния с квадратным сечением, т. е. первый из обнаруженных в работе [15] эффектов. Причем для всех образцов, имеющих различные направления теплового потока относительно кристаллографических осей, без использования подгоночных параметров (см. рисунок 2.3). Максимальная теплопроводность наблюдается для образцов с направлением потока тепла вдоль [100], и при низких температурах она превышает теплопроводность образцов с осью вдоль [110] и [111] соответственно на 36 и 50%. оценки согласуются с экспериментальными данными Эти по анизотропии теплопроводности [15]. Использование формул (2.10), (2.11), а также (2.14) – (2.17) для рассеяния фононов на границах позволяет удовлетворительно описать второй эффект МакКарди [15] зависимость теплопроводности от ориентации широких граней образца. Из рисунка 2.4 видно, что температурные зависимости теплопроводности, рассчитанные для двух образцов с прямоугольным сечением, имеющих одинаковые площадь поперечного сечения и направление градиента температуры, но различные ориентации широких граней образцов, хорошо согласуются с данными эксперимента [15] (см. рисунок 2.4). При Т=3 К для образца с широкой гранью {100} и узкой {110} теплопроводность на 31% выше, чем для образца с широкой гранью



Рисунок 2.4 – Температурные зависимости теплопроводности для образцов с прямоугольным сечением (L=3.5 см, D_1 =0.185 см, D_2 = μD_1 =0.638 см, μ =3.45) и ориентацией градиента температуры в направлении [110]. Кривая 1 относится к образцам с широкой гранью {100}, кривая 2 относится к образцам с широкой гранью {110}. Символы – экспериментальные значения [15].

результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом в интервале температур от 3 до 15 К $\{110\}$ и узкой $\{100\}$. В пределах погрешности эксперимента этот результат согласуется с экспериментальным значением 33%. Отметим, что для образцов с прямоугольным сечением, как и для образцов с квадратным сечением в интервале температур 3 К < T < 15 К отклонение рассчитанных значений к(T) от экспериментальных данных [15] не превышает погрешности эксперимента. Таким образом, в интервале температур, где доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке, наша теория количественно описывает оба эффекта в теплопроводности кристаллов кремния, обнаруженных в работе МакКарди [15] без использования подгоночных параметров. Эти результаты свидетельствуют, что аналитические решения для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины, полученные в [36-37] (см. также приложение А), вполне адекватны реальной ситуации и могут быть использованы при интерпретации особенностей фононного транспорта в других полупроводниковых и диэлектрических кристаллах.

Экспериментальные данные [15] показывают, что при переходе от режима граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации (выше максимума) анизотропия теплопроводности быстро убывает с повышением температуры (см. рисунки 2.3 и 2.4). Различие экспериментальных значений $\kappa(T)$ для симметричных направлений в окрестности максимума не превышает 6%, а при T = 40 K их значения в пределах погрешности эксперимента совпадают, т.е. эффект фокусировки фононов уже не сказывается на величинах теплопроводности. Максимальное различие рассчитанных и экспериментальных значений [15] имеет место в окрестности максимума теплопроводности. Так, например, при T_{max}=25 К значения теплопроводности оказываются выше на 5%, а в направлениях [101] и [111] ниже экспериментальных величин на 4% и 6%, соответственно. Хотя отклонение от экспериментальных данных в окрестности максимума не велико, расчеты дают максимальное значение анизотропии 19%, это заметно больше, чем получено из эксперимента. При более высоких температурах анизотропия теплопроводности быстро уменьшается: согласно нашим расчетам при T = 60 K она равна погрешности эксперимента (4%). Как уже отмечали, возможной причиной расхождения с экспериментальными данными в области маскимума является использование правила Маттиссена при переходе от граничного рассеяния к объемному. Это приближение дает слишком медленное уменьшение анизотропии теплопроводности, связанное с фокусировкой и, видимо, не является достаточно точной процедурой в данном случае.

Херринг [68, 108], анализируя роль низкоэнергетических фононов в теплопроводности и термоэдс монокристаллических полупроводников, также указал на слабость правила Маттиссена при температурах вблизи максимума $\kappa(T)$. Связано это с тем, что граничное рассеяние фононов происходит вблизи поверхности образца, а объёмные процессы рассеяния происходят

72
равномерно по всему объему. Поэтому они не могут аддитивно складываться, как это следует из правила Маттиссена. Очевидно, что максимальное отклонение от правила Маттиссена будет иметь место в условиях, когда скорости релаксации фононов в объёмных механизмах и граничном рассеянии сравниваются. Для того, чтобы корректно учесть совместное действие граничного и объёмных механизмов рассеяние фононов, необходимо решить кинетическое уравнение Больцмана при неоднородном распределении теплового потока по поперечному сечению образца. При учете фокусировки фононов эта задача является достаточно сложной и требует отдельного рассмотрения.

Сравним роль граничного и объемных механизмов рассеяния фононов в теплопроводности кристаллов кремния (см. рисунок 2.5). Для этого рассчитаем температурные зависимости теплопроводности к(*T*) в режиме граничного рассеяния фононов ($v_{(2)}^{\lambda}(q) = v_{B}^{\lambda}(q)$) (кривая 2) и при учете только объемных механизмов релаксации фононов $v_{(5)}^{\lambda}(q) = v_{iso}^{\lambda}(q) + v_{U}^{\lambda}(q) + v_{N}^{\lambda}(q)$ (кривая 5) (см. рисунок 2.5). При температурах ниже максимума теплопроводности доминирующий вклад в теплосопротивление вносят рассеяние на границах и изотопическом беспорядке. Причем, при *T*=3 K рассеяние на границах обеспечивает 95% теплосопротивления, а изотопическое рассеяние – 5%. С увеличением температуры относительный вклад рассеяния на границах уменьшается, а вклад объемных механизмов релаксации возрастает. При температуре $T_{BV} = 18.5$ K для кристаллов Si^{nat} с натуральным



Рисунок 2.5 – Температурные зависимости теплопроводности для направления [100] при учете всех механизмов релаксации (кривая 1) и ее зависимости для различных механизмов релаксации фононов: кривая 2 - теплопроводность в режиме граничного рассеяния, кривая 3 - для моноизотопного образца Si²⁸, кривая 4 – для ангармонических процессов рассеяния, кривая 5 - для объемных механизмов рассеяния.

составом изотопов происходит пересечение кривых 2 и 5. Это означает, что вклады в теплосопротивление от объемных механизмов релаксации и граничного рассеяния сравниваются, и при при $T = T_{BV}$ происходит переход от режима граничного рассеяния к доминирующей роли объемных механизмов релаксации (см. рисунок 2.5). Если мы предположим, что при переходе к изотопически чистым кристаллам кремния Si²⁸ скорости релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния (процессах переброса и нормальных процессах рассеяния) не изменятся, то можно оценить изотопический эффект в теплопроводности Si²⁸ и определить для них температуру перехода T_{RV} . В этом случае пересечение кривой 2 и кривой 4, учитывающей только ангармонические процессы рассеяния ($v_{(4)}^{\lambda}(q) = v_{U}^{\lambda}(q) + v_{N}^{\lambda}(q)$), происходит при более высокой температуре $T_{BV} = 22.4$ К. При этом температура максимума теплопроводности уменьшается от 25 К для Si^{nat} до 20 К для изотопически чистого кремния Si²⁸. Максимальные значения теплопроводности при переходе от кристаллов Si^{nat} к изотопически чистым кристаллам Si²⁸ увеличиваются в 3.5 раза Это означает, что при $T=T_{\text{max}}$ вклад изотопического рассеяния в теплосопротивление оказывается в 3.5 раза больше, чем суммарный вклад остальных механизмов релаксации фононов. Мы дали достаточно грубую оценку изотопического эффекта в теплопроводности кристаллов кремния, которая не учитывает возможное нарушение правила Маттисена для граничного и объёмных механизмов релаксации, а также интерференцию изотопического и ангармоническиз процессов рассеяния.

2.4 Физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности кубических кристаллов

Эффекты, обнаруженные в работе [15] для кристаллов Si и CaF₂, имеют достаточно большую величину, поэтому представляет интерес рассчитать их значения для других упруго анизотропных кристаллов. Для анализа эффектов МакКарди рассмотрим стержни с квадратным и прямоугольным сечениями тех же геометрических размеров, что и в работе [15], чтобы иметь возможность сравнить рассчитанные значения с экспериментально измеренными величинами эффектов для образцов Si и CaF₂. Поэтому при анализе первого эффекта рассмотрим стержни с квадратным сечением со стороной D=0.293 см и длиной L=2.9 см, вырезанные с осями вдоль трех симметричных направлений [100], [110] и [111]. Рассчитаем значения теплопроводности при T = 3 K, как и в работе [15], когда фонон-фононные механизмы выморожены и доминирует диффузное рассеяние фононов на границах. Составим отношение теплопроводностей для симметричных направлений и определим величины первого эффекта МакКарди для упруго

анизотропных кристаллов: для кремния этот эффект, согласно [1], определяется отношениями $\kappa_{[001]}:\kappa_{[110]}:\kappa_{[111]}\approx 1.53:1.08:1$

При анализе второго эффекта МакКарди рассмотрим стержни с прямоугольным сечением со сторонами $D_1=0.185$ см и $D_2=\mu D_1=0.638$ см ($\mu=3.45$) и длиной $L=5.5\mu D_1$, вырезанные с осями вдоль направления [110] и ориентацией боковых граней {001} и {110}. Причем, ориентация широкой грани у одного из стержней будет {001}, а у другого - {110}. Составим отношение теплопроводностей для направления теплового потока [110] и двух ориентаций широких граней образца. Для кристаллов кремния при T=3 К отношение, определяющее величину второго эффекта МакКарди, имеет вид $\kappa_{[011]}^{(001)} \approx 1.33:1$. Ориентация широких граней образца указана верхним индексом в коэффициенте теплопроводности.

Далее мы проанализируем эффекты МакКарди в кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Анализ уравнений Кристоффеля в работе [35] показал, что влияние анизотропии упругой энергии на спектр и векторы поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром k-1. В зависимости от знака параметра k-1, согласно [35], все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной k-1 > 0 (GaN, Ge, Si, алмаз, LiF GaSb, GaAs) и отрицательной k-1 < 0 (CaF₂, SrF₂ и PbS) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу 2.2). Для изотропных сред параметр k-1=0. Как это видно из таблицы 2.2, соотношения величин, характеризующих эффекты МакКарди в кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии, качественно отличаются. В строчках *Si и *CaF₂ (в таблице 2.2) приведены экспериментальные данные первого эффекта МакКарди [15] для образцов с квадратным сечением. Как видно из таблицы, рассчитанные значения первого и второго эффектов МакКарди для Si и CaF₂ согласуются с экспериментальными данными в пределах погрешности эксперимента [15]. Анизотропия теплопроводности в полупроводниковых кристаллах первого и второго типа качественно отличается. Из таблицы 2.2 видно, для большинства наиболее актуальных и используемых в технических приложениях полупроводников первого типа таких, как GaAs, GaSb, LiF, InSb, Ge, Si, HgSe, MgO, при T=3 K величины теплопроводности достигают максимума в направлениях типа [001] и оказываются на 50% больше минимальных значений в направлении [111]. Для кристаллов второго типа – ситуация обратная: теплопроводность достигает максимума в направлениях типа [111], а минимальных значений – в направлениях типа [001]. Для кристаллов NaCl, PbS, SrF₂ теплопроводность в направлении [111] на 30%, а для CaF₂, на 40% больше, чем в направлении [001]. Таким образом, для значительного числа кристаллов с достаточно большим параметром |*k*-1 анизотропия теплопроводности не является малой, и фокусировка фононов должна учитываться при анализе теплопроводящих свойств.

Таблица 2.2 – Отношения теплопроводностей для кубических кристаллов в режиме кнудсеновского течения фононного газа при *T*=3 К: первый эффект МакКарди [15] ($\kappa_{[100]}^{(100]}$: $\kappa_{[110]}^{(110]}$: $\kappa_{[111]}^{(110]}$) для образцов с квадратным сечением (*L*=2.9 см, *D*=0.293 см); второй эффект МакКарди [1] ($\kappa_{[110]}^{(100]}$: $\kappa_{[110]}^{(110]}$) для образцов с прямоугольным сечением (*L*=5.5 μ D₁, D₁=0.185 см, D₂= μ D₁=0.638 см, μ =3.45), ориентация широких граней {100} и {110} указана в верхних индексах.

		a 10 ¹²	a 10 ¹²	a 10 ¹²		Первый	Второй	Второй
Тип	Кристалл	$c_{11}, 10$	$c_{12}, 10$	$c_{44}, 10$	<i>k</i> -1	эффект	эффект	эффект
		дин/см	дин/см	дин/см		$\mu = 1$	µ=3.45	$\mu = 10$
Ι	GaN	2.93	1.59	1.55	1.275	1.43:1.07:1	1.28:1	1.49:1
	Ge	1.289	0.483	0.671	0.87	1.49:1.08:1	1.30:1	1.67:1
	Si	1.677	0.65	0.804	0.67	1.50:1.08:1	1.30:1	1.71:1
	*Si	1.677	0.65	0.804	0.67	1.53:1.07:1	1.33:1	-
	GaAs	1.1904	0.5384	0.5952	0.90	1.51:1.08:1	1.32:1	1.63:1
	HgSe	0.69	0.51	0.23	0.61	1.52:1.13:1	1.34:1	1.62:1
	GaSb	0.885	0.404	0.433	0.85	1.51:1.09:1	1.32:1	1.64:1
	InSb	0.672	0.367	0.302	0.81	1.53:1.09:1	1.33:1	1.62:1
	LiF	1.246	0.424	0.649	0.78	1.48:1.08:1	1.29:1	1.68:1
	MgO	2.86	0.87	1.48	0.703	1.45:1.07:1	1.26:1	1.63:1
	Алмаз	10.76	1.25	5.76	0.40	1.20:1.03:1	1.10:1	1.19:1
	YAG	3.281	1.064	1.137	0.03	1.03:1.01:1	1.02:1	1.03:1
II	KCl	0.398	0.062	0.0625	-0.63	1:1.02:1.08	1:1.02	1:1.00
	NaCl	0.575	0.099	0.133	-0.48	1:1.20:1.32	1:1.18	1:1.27
	PbS	1.27	0.298	0.248	-0.47	1:1.19:1.33	1:1.16	1:1.24
	CaF ₂	1.74	0.56	0.359	-0.33	1:1.28:1.42	1:1.27	1:1.45
	*CaF ₂	1.74	0.56	0.359	-0.33	1:1.31:1.44	-	-
	SrF_2	1.24	0.43	0.31	-0.20	1:1.23:1.30	1:1.25	1:1.59
	YIG	2.69	1.077	0.764	-0.04	1:1.05:1.06	1:1.04	1:1.06

Что касается второго эффекта МакКарди, то для кристаллов первого типа GaN, GaAs, GaSb, LiF, InSb, Ge, HgSe, MgO с теми же геометрическими параметрами образцов при T = 3 К эффект имеет такую же величину, как и для Si. Для направления градиента температур [110] теплопроводность образцов с ориентацией широких граней {100} оказывается на 30% больше, чем для образцов с ориентацией широких граней {110}. Однако в кристаллах второго типа для направления градиента температур [110] теплопроводность образцов с ориентацией широких граней {110}. Однако в кристаллах второго типа для направления градиента температур [110] теплопроводность образцов с ориентацией широких граней {100} оказывается меньше, чем для образцов с ориентацией широких граней {100} оказывается меньше, чем для образцов с ориентацией широких граней {100}, для них величины, характеризующие второй эффект МакКарди [15], заметно меньше: только для CaF₂ и SrF₂ его величины превышают 25%, а для NaCl и PbS они – менее 20% (см. таблицу 2.2). Этот эффект также не является малым и должен учитываться при интерпретации экспериментальных данных.

Анализ показал, что увеличение отношения ширины пластины к ее толщине (параметр μ) приводит к увеличению второго эффекта МакКарди. Поэтому в последнем столбце таблицы 2.2 мы привели результаты расчета второго эффекта МакКарди для образцов с прямоугольным сечением ($L=5.5\mu D_1$, $D_1=0.185$ см, $D_2=\mu D_1$, $\mu=10$). Как видно из таблицы 2.2, значения второго эффекта увеличились примерно в два раза: для кристаллов InSb, MgO, GaAs, GaSb, Ge, LiF, Si величина эффекта возрастает от 63% до 71%, соответственно (см. таблицу 2.2). Приведенные выше результаты характеризуют роль фокусировки фононов в анизотропии теплопроводности. Можно надеяться, что они будут полезны при исследовании процессов теплопереноса в упруго анизотропных кристаллах.

Проанализируем фокусировки влияние на распространение фононов В монокристаллических образцах с квадратным сечением и дадим наглядное физическое объяснение анизотропии теплопроводности, т.е. первого эффекта МакКарди. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность упруго анизотропных кристаллов связано с отличием направлений волнового вектора и групповой скорости, которая определяет направление распространения (см. рисунок 2.6). Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере моды t_2 в кристаллах Si для волновых векторов в плоскости {100} (см. рисунок 2.6а). Построим для неё изоэнергетическую поверхность и определим направления групповых скоростей фононов. Характерные углы θ_1 , θ_2 , θ_3 u θ_4 определены в разделе 1.5. В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, и фононы с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$ будут распространяться в том же самом секторе. Однако, как видно из рисунка 2.6, в кремнии направления волновых векторов и



Рисунок 2.6 – (а) Схема, иллюстрирующая фокусировку медленных поперечных мод в кристаллах Si для сечения изоэнергетической поверхности плоскостью {100}. Стрелками изображены волновые векторы внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её. (б) Схема, иллюстрирующая влияние фокусировки на распространение фононов в образцах Si длиной *L* с квадратным сечением $D \times D$ для волновых векторов в плоскости {100} с углами $\theta_1^{t^2} = 23.6^\circ$, $\theta_2^{t^2} = 11.9^\circ$, $\theta_3^{t^2} = 6.8^\circ$, $\theta_4^{t^2} = 28.6^\circ$ и градиентом температуры вдоль [100].

групповых скоростей отличаются, и фононы медленной поперечной моды будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$, который определяется направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности (см. подробнее [73, 75]). Так, например, в кристаллах Si с квадратным сечением для теплового потока в направлении [100] фононы с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$ (для Si $\theta_4 = 28.6^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$, где для Si $\theta_3 = 6.8^\circ$ (см. рисунок 2.6). В результате в секторе фокусировки $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ средняя плотность состояний моды t_2 для Si будет в отношении $\theta_4/\theta_3 \approx 4.2$ больше, чем в изотропной среде. Напротив, для сектора дефокусировки $\pi/2 - \theta_3 \ge \theta \ge \theta_3$ она будет в 2.3 раза меньше, чем в изотропной среде. При этом средняя ПФС моды t_2 в кристаллах Si в секторе фокусировки будет в 9.9 раза больше, чем в секторе дефокусировки (см. раздел 1.5).

Далее рассмотрим более подробно влияние фокусировки на распространение фононных мод в образцах Si с квадратным сечением. Можно надеяться, что это будет полезно в технических приложениях при конструировании кремниевых электронных приборов. Отметим некоторые особенности, обусловленные влиянием фокусировки на распространение фононов t2-моды в плоскости {100}. Во-первых, фононы с волновыми векторами q_1 (для Si $\theta_1 = 23.6^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока [100] (см. рисунок 2.6). Длина пробега при диффузном отражении от границ может быть ограничена для них либо объёмными механизмами релаксации, либо длиной образца. Во-вторых, поскольку в кристаллах Si фононы моды t2 с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$ будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться под меньшими углами – в секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$ то длина свободного пробега для них может значительно возрасти (см. рисунок 2.6). Заметим, что при диффузном рассеянии длина свободного пробега фонона с волновым вектором q определяется расстоянием, пройденным фононом до столкновения с поверхностью образца. Так, например, для Si фононы с волновым вектором $\pm q_4$ и углом $\theta_4^{\prime 2} = 28.6^{\circ}$ будут распространяться под существенно меньшим углом $\theta_3 = 6.8^\circ$, в результате длина пробега возрастет (см. рисунок 2.6). Для продольной моды направление [001] является направлением дефокусировки. Поэтому продольные фононы будут отклоняться от оси образца в сторону боковой грани, и их длина свободного пробега будет меньше, чем в модели изотропной среды (см. рисунок 2.6). Для волновых векторов в плоскости {100} быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует. Длина свободного пробега будет совпадать с полученной в модели изотропной среды (см. рисунок 2.6). Итак, из схем, приведенных на рисунке 2.6, следует, что максимум теплопроводности для

кристаллов первого типа в направлениях типа [100] обусловлен вкладом медленных поперечных фононов.

Рассмотрим распространение фононных мод в сечении образца {100} в случае, когда градиент температуры направлен вдоль [110]. Направление [110] соответствует направлению дефокусировки медленной *t*₂-моды. Поэтому фононы этой моды будут отклоняться в сторону



Рисунок 2.7 – Схема, иллюстрирующая эффект фокусировки фононов в образцах Si с прямоугольным сечением для волновых векторов в плоскости {100} и градиента температуры вдоль [110].

грани образца, и длина свободного пробега будет меньше, чем в модели изотропной среды (см. рисунок 2.7). Для волновых векторов в плоскости {100} быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует. Длина свободного пробега будет совпадать с полученной в модели изотропной среды (см. рисунок 2.7). Продольные фононы в этой плоскости имеют локальную фокусировку в направлении [110]. Они будут отклоняться к оси образца, и длина свободного пробега будет больше, чем в модели изотропной среды. Следует отметить, что роль продольных фононов в фононном транспорте для кремния мала, поскольку их теплоемкость на порядок меньше суммарной теплоемкости поперечных фононов, а вклад в теплопроводность для направлений [001] и [110] составляет всего 8 и 15%, соответственно.

Проанализируем особенности распространения фононов для волновых векторов фононов в плоскости {110} и градиента температуры в направлении [110]. В плоскости {110} быстрая поперечная мода фокусируется в направлениях типа [110] (см. рисунок 1.12б). Для неё фононы будут отклоняться к оси образца и длина свободного пробега будет больше, чем в модели изотропной среды. Однако эффект фокусировки для неё выражен слабее, чем для медленной поперечной моды в направлении [001] (см. рисунок 2.6). Поэтому средняя по модам длина свободного пробега фононов и, соответственно, теплопроводность в направлении [110] оказывается на 40% меньше, чем в направлении [001]. В направлении [111] фокусируются продольные фононы, длина свободного пробега увеличивается почти в 2 раза по сравнению с направлением дефокусировки [001] и принимает максимальное значение (см. рисунок 2.6). В этом направлении быстрая поперечная мода дефокусируется, и её длина свободного пробега фононов будет меньше, чем в модели изотропной среды. Фононы медленной поперечной моды в этом направлении имеют локальный максимум фокусировки, длина пробега для них незначительно превосходит значение в модели изотропной среды (см. рисунок 2.6). Поскольку теплоемкость продольных фононов мала, то полная теплопроводность и средняя длина пробега фононов в направлении [111] принимает минимальное значение.

Непосредственный расчет длин свободного пробега подтверждает приведенные выше качественные рассуждения (см. рисунок 2.6). В работе [36] было показано, что длины свободного пробега для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега остальных колебательных мод. Минимальные значения достигаются в направлениях дефокусировки, причем, они оказываются меньше рассчитанных в модели изотропной среды. Так, например, в кристаллах Si длина свободного пробега медленной поперечной моды t_2 в направлениях фокусировки превосходит длины пробега быстрой поперечной моды t_2 благодаря эффекту фокусировки также возрастает, то в результате действия этих двух эффектов вклад медленных поперечных фононов в теплопроводность для направления [100] при температуре T=3 K достигает 61% полной теплопроводности и в два раза превышает вклад быстрой поперечной моды. Итак, первый эффект МакКарди в образцах Si обусловлен медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении [001] и обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении.

Проанализируем влияние фокусировки на распространение фононов в монокристаллических образцах с прямоугольным сечением и дадим физическое объяснение вторму эффекту МакКарди. Рассмотрим сначала образцы с широкой гранью {001} и узкой {110}. Основной вклад в граничное рассеяние фононов вносит рассеяние на широких гранях образца (плоскостях пленок). Поэтому проанализируем фокусировку и дефокусировку фононов различных поляризаций в плоскости {110}, перпендикулярной широкой грани образца и их отклонение от направления градиента температуры [110] (см. рисунок 2.8).

В направлении [110] фокусируются фононы быстрой поперечной моды, поэтому они будут отклоняться от широкой грани образца к направлению градиента температур (см. рисунок 2.8). Длина свободного пробега для них будет больше, чем в модели изотропной среды. Как видно из рисунка 2.8, в образцах Si с прямоугольным сечением для теплового потока в



Рисунок 2.8 – Схемы, иллюстрирующие влияние фокусировки на распространение фононов в образцах Si с прямоугольным сечением в плоскости {110} и градиента температуры вдоль [110]. Рассмотрены фононы быстрой t_1 -моды с волновыми векторами, направленными под углами $\theta_1^{\prime 1} = 13.4^\circ$, $\theta_2^{\prime 1} = 7.5^\circ$, $\theta_3^{\prime 1} = 0.86^\circ$ И $\theta_4^{\prime 1} = 15.7^\circ$.

направлении [110] фононы t_1 -моды с волновыми векторами в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$ (для t_1 -моды в плоскости {110} $\theta_4 = 15.7^\circ$) будут отклоняться от боковых граней к оси стержня и распространяться в секторе $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ для Si $\theta_3^{\prime 1} = 0.86^\circ$. В результате для направлений [110] плотность фононных состояний для t_1 -моды будет существенно больше, а для направлений дефокусировки значительно меньше, чем для изотропной среды (см. раздел 1.3). При этом фононы t_1 -моды в плоскости {110} с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом θ_1 (для Si $\theta_1^{\prime 1} = 13.4^\circ$) будут распространяться в направлении теплового потока [110], а фононы с волновым вектором \mathbf{q}_2 и углом θ_2 (для t_1 -моды $\theta_2^{\prime 1} = 7.5^\circ$) будут распространяться под углом $-\theta_3$ ($\theta_3^{\prime 1} = 0.86^\circ$) (см. рисунок 2.8).

Направление [110] является направлением дефокусировки медленной *t*₂-моды, для неё длина свободного пробега меньше, чем в изотропной среде (см. рисунок 2.8). Продольные фононы фокусируются в направлении [111], а направление [110] соответствует направлению дефокусировки для волновых векторов в плоскости {110}. Поэтому они будут отклоняться от направления градиента температур к широкой грани образца, длина свободного пробега будет меньше, чем в модели изотропной среды. Как уже отмечалось, роль продольных фононов в фононном транспорте мала в связи с малой теплоемкостью.

Другая ситуация складывается для образцов с широкой гранью {110} и узкой {001}. Аналогично предыдущему случаю мы должны рассматривать фокусировку фононов в плоскости перпендикулярной широкой грани, т.е. в {001}. В плоскости {001} быстрая поперечная мода изотропна, эффект фокусировки для нее отсутствует, и длина свободного пробега для неё будет совпадать с полученной в модели изотропной среды. В этой плоскости, как и в плоскости {110} для направления [110] медленная *t*₂-моды дефокусируется. Поэтому фононы этой моды будут



Рисунок 2.9 – изоэнергетическая рповерхность кристаллов CaF₂ для волновых векторов в плоскости грани куба и диагональной плоскости.

отклоняться от направления градиента температуры в сторону широкой грани, и длина свободного пробега, как и в предыдущем случае, будет меньше, чем в модели изотропной среды (см. рисунок 2.8). Продольные фононы в плоскости {001} имеют локальную фокусировку в направлении [110], и они будут отклоняться от широкой грани образца к направлению градиента температур. Однако, как уже отмечали выше, их роль в теплопроводности мала. Очевидно, что в рассматриваемом случае средняя длина свободного пробега и теплопроводность для образцов с широкой гранью {001} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {110}. Непосредственный расчет дает величину эффекта 31%. Авторы [15] очень удачно выбрали направление [110] для направления теплового потока, поскольку в этом направлении медленная поперечная мода дефокусируется как в плоскости {001}, так и в плоскости {110}. Напротив, в направлении [110] быстрая поперечная моды в плоскости {110} фокусируется, а в плоскости {001} фокусировки отсутствует. Если мы возьмем образцы кремния с прямоугольным сечением и тех же геометрических параметров, как в [15], но вырежем их в направлении [100], то получим для образца с широкой гранью {100} теплопроводность всего лишь на 5% выше, чем для образца с широкой гранью {110}. Другая ситуация имеет место для кристаллов второго типа с *k*-1<0 (типа CaF₂) для образцов с широкой гранью {110} и узкой {001}, в сечении {100} медленная мода изотропна, а быстрая поперечная мода фокусируется в направлении [110] (см. рисунок 2.9). Если же мы возьмем образец с широкой гранью {001} и узкой {110}, то в в сечении {110} обе поперечных моды будут дефокусироваться (см. рисунок 2.9) Таким образом теплопроводность для образцов с широкой гранью {011} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {100}. Итак, из приведенного выше анализа следует, что второй эффект МакКарди [19] обусловлен фокусировкой быстрой t₁-моды в направлении [110] для волновых векторов в диагональной плоскости.

2.5 Выводы

Основные результаты второй главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Разработан метод расчета теплопроводности упруго анизотропных диэлектрических образцов конечной длины с учетом фокусировки фононов.

2. Использование полученных нами выражений для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины с квадратным и прямоугольным сечениями позволило адекватно описать экспериментальные данные по теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур. Показано, что в интервале температур от 3 до 15 К, в котором доминирует рассеяние на границах и изотопическом беспорядке, наша теория количественно в пределах погрешности эксперимента описывает температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния для всех направлений теплового потока в образцах с квадратным сечением, а также их зависимости от ориентации боковых граней для образцов с прямоугольным сечением без использования подгоночных параметров.

3. Показано, что анизотропия теплопроводности образцов кремния с квадратным сечением обусловлена, главным образом, вкладом медленной *t*₂-моды. Фононы *t*₂-моды фокусируются в направлениях типа [001] и обеспечивают максимум теплопроводности в этом направлении, а минимум теплопроводности реализуется в направлении [111], которое соответствует направлению дефокусировки медленной *t*₂-моды.

4. Дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии. Показано, что первый эффект МакКарди в образцах с квадратным сечением обусловлен фокусировкой медленной t_2 -моды в кристаллах обоих типов. Причем, в кристаллах первого типа с k-1>0 (типа Si) её фокусировка и максимум теплопроводности достигается в направлениях [001], тогда как в кристаллах второго типа с k-1<0 (типа CaF₂) фокусировка медленной t_2 -моды и максимум теплопроводности [111], соответствующих минимуму теплопроводности в кристаллах первого типа.

5. Исследование влияния фокусировки на теплопроводность образцов с прямоугольным сечением в направлении [011] и различной ориентацией широких граней показало, что второй эффект МакКарди обусловлен доминирующей ролью рассеяния фононов на широких гранях образца и фокусировкой быстрой t_1 -моды в кристаллах обоих типов. Причем, в кристаллах первого типа с k-1>0 (типа Si) теплопроводность образцов с широкой гранью {001} будет больше, чем образцов с широкой гранью {110}, тогда как в кристаллах второго типа с k-1<0 (типа CaF₂)

 наоборот: теплопроводность образцов с широкой гранью {011} будет больше, чем образцов с широкой гранью {100}.

Основные результаты, приведенные в Главе 2, опубликованы в работах [А8, А25, А26].

3 Фононный транспорт в наноструктурах на основе диэлектрических и полупроводниковых кристаллов и материалов спинтроники

В настоящей главе рассмотрим особенности фононного транспорта в полупроводниковых и диэлектрических наноструктурах с различным типом анизотропии упругой энергии, а также из материалов, используемых для создания спинтронных наноструктур. К таким структурам относятся: 1) металлические сверхрешетки Fe/Cr, Co/Cu, CoFe/Cu, в которых наблюдается особое магнитное упорядочение магнитных слоев, определяющее закономерности спинового транспорта, которые проявляются как эффект гигантского магнитосопротивления [109-113], 2) наногетероструктуры Fe/MgO/Fe с туннельным барьером MgO, демонстрирующие эффект гигантского туннельного магнитосопротивления [114, 115], 3) гибридные гетероструктуры Fe/GaAs и Fe/InSb, в которых реализована спиновая инжекция электронов проводимости из металлического ферромагнетика в полупроводник [116, 117]. В настоящее время ведутся активные исследования возможности управления магнитным состоянием таких наноструктур путем пропускания токов достаточно высокой величины, что предопределяет необходимость решения проблемы отвода тепла, выделяющегося в наноструктурах при протекании электрического тока. Поэтому фононный транспорт в наноструктурах из указанных выше материалов: металлов Fe, Cu, диэлектрика MgO и полупроводников InSb и GaAs и является предметом рассмотрения настоящей главы.

3.1 Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопроводах из материалов спинтроники

Прежде чем исследовать фононный транспорт в нанопроводах рассмотрим фокусировку фононов в кристаллах Fe, Cu, MgO и InSb при низких температурах, когда доминирующую роль играет диффузное рассеяние фононов на границах образца. При температурах, гораздо меньших температуры Дебая, в фононном транспорте доминируют длинноволновые фононы, волновой вектор которых гораздо меньше дебаевского $q \ll q_D$. Поэтому для фононов воспользуемся моделью анизотропного континуума. Угловые зависимости фазовых скоростей акустических мод в кристаллах Fe, MgO и InSb для волновых векторов в плоскости грани куба приведены на рисунке 3.1a. Значения модулей упругости второго порядка взяты из работ [25, 118, 119]. Следует отметить, что величины упругих модулей в кристаллах InSb значительно меньше, чем в Fe и MgO (см. таблицу 3.1). В связи с этим для InSb в направлениях типа [100] фазовые скорости продольных и поперечных фононов почти в два раза меньше, чем в Fe. Параметр анизотропии



Рисунок 3.1 – Угловые зависимости фазовых скоростей $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ (10⁵ см/с) в кристаллах Fe (сплошные кривые 1, 2, 3) и MgO (штриховые кривые 1а, 2а, 3а) (а) для волновых векторов в плоскости грани куба и (б) для волновых векторов в диагональной плоскости: кривые 1,1а – для продольных, 2, 2а – для быстрых, 3, 3а – для медленных поперечных фононов.

упругой энергии k-1 имеет максимальное значение место для кристаллов Fe, а минимальное - для кристаллов MgO. Все кристаллы, данные для которых приведены в таблице 3.1, согласно [35], относятся к кристаллам с положительной анизотропией упругой энергии, поскольку параметр анизотропии k-1>0. Поэтому угловые зависимости фазовых скоростей для всех акустических мод качественно подобны: максимальные и минимальные значения фазовых скоростей для всех кристаллов достигаются в одних и тех же направлениях. Они отличаются фактически только большей или меньшей анизотропией фазовых скоростей (см. рисунок 3.1а). Как видно из рисунка, максимальную анизотропию в плоскости {100} имеет $S^{12}(\theta, \varphi)$ медленная t_2 -мода. Проиллюстрируем фокусировку фононов для медленных и быстрых поперечных мод в кристаллах Fe в плоскостях {100} и {110}. Построим для них изоэнергетическую поверхность

Таблица 3.1 – Упругие модули второго порядка c_{ij} (10¹² дин/см²), плотность ρ (г/см³), параметр анизотропии *k*-1 и характерные углы $\theta_1^{t2\{100\}}$, $\theta_2^{t2\{100\}}$, $\theta_3^{t2\{100\}}$.

Кристалл	<i>C</i> ₁₁	<i>C</i> ₁₂	C44	ρ	<i>k</i> -1	$ heta_1^{t2\{100\}}$	$ heta_2^{t2\{100\}}$	$ heta_3^{t2\{100\}}$
Fe	2.43	1.38	1.22	7.87	1.15	33.2°	14.9°	19.5°
Cu	1.684	1.214	0.754	8.94	1.12	37.2°	16.6°	26.4°
MgO	3.0617	0.9378	1.5758	3.58	0.69	21.2°	10.9°	5.2°
InSb	0.672	0.367	0.302	5.76	0.81	30.9°	14.3°	14.9°

86



Рисунок 3.2 – Фокусировка медленных и быстрых поперечных мод в кристаллах Fe для сечений изоэнергетической поверхности (а) плоскостью XZ для моды t_2 и (б) диагональной плоскостью для t_1 и t_2 мод. Стрелками изображены волновые векторы внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне ее.

(см. рисунок 3.2). Направление групповой скорости фонона, определяющие направление переноса энергии, перпендикулярны этой поверхности. Как видно из рисунка 3.2a, расходящийся сектор волновых векторов $-\theta_1 \le \theta \le \theta_1$ в плоскости {100} для моды t_2 превращается в сходящийся к направлению [001] сектор групповых скоростей. Угол θ_1 определяет направление волнового вектора, для которого вектор групповой скорости $\mathbf{V}_{g}^{t^{2}}(\boldsymbol{\theta}_{g})$ параллелен направлению фокусировки. В нашем случае - направлению [001], поэтому $\theta_g^{\lambda} = n\pi/2$, где n – целое число (см. рисунок 3.2а). Угол θ_{g} определяет направление групповой скорости в плоскости {100}. Таким образом, угол 2 θ_1 в пространстве волновых векторов определяет область фокусировки фононов. Характерными особенностями на изоэнергетической поверхности (поверхности медленности) являются линии нулевой кривизны, в которых происходит переход от выпуклых к вогнутым областям. Для сечения этой поверхности плоскостью грани куба {100} мы получаем точки нулевой кривизны, угол между которыми равен 2 θ_2 (см. рисунок 3.2a). В этих точках вектор групповой скорости фонона имеет максимальное схождение к направлению [100], и этот угол мы обозначим как $\theta_3 = \theta_g^{\lambda}(\theta_2)$. Построив $\mathbf{V}_g^{\prime 2}$ для углов $-\theta_2 \leq \theta \leq \theta_2$, мы определим угол «схождения» групповых скоростей $heta_3$, или, точнее, величину сектора, внутри которого будут распространяться фононы с волновыми векторами, принадлежащие сектору $-\theta_1 \le \theta \le \theta_1$ (см. рисунок 3.1а). В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают, поэтому фононы, распространяющиеся в изотропной среде в секторе $-\theta_1 \le \theta \le \theta_1$, в кристаллах Fe и MgO будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ (см.

рисунок 3.2а). Таким образом, плотность фонноных состояний для этой моды в направлениях, близких к [100], существенно возрастает по сравнению с изотропной средой. Для плоскости {110} аналогично можно показать, что продольные фононы фокусируются в направлении [111], а быстрая поперечная мода – в направлении [110]. Из сравнения рисунков 3.1 и 3.2 видно, что фокусировка фононов происходит в тех направлениях, где поверхность постоянной частоты принимает минимальные значения, а фазовая скорость – максимальные.

Предложенный нами метод анализа фокусировки позволяет сделать количественные оценки изменения угловых распределений плотности фононных состояний (ПФС) для медленных квазипоперечных мод для исследуемых кристаллов в координатном пространстве. Для этого введем среднюю плотность фононных состояний моды t2 для волновых векторов в плоскости {100}, приходящуюся на единичный угол для областей фокусировки $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ $N_{F}^{t2 \{100\}}$ и изотропной среды $N_{iso} = N_{iso}/2\pi$. Поскольку расходящийся сектор волновых векторов для изотропной среды в плоскости {100} с углом 2 θ_1 (например, для MgO 2 θ_1 =42.4°) превращается в расходящийся сектор векторов групповых скоростей фононов с углом 2 θ_3 (например, для MgO $2\theta_3 = 10.4^\circ$), то средняя плотность состояний в областях фокусировки фононов будет больше, чем в изотропной среде в отношении $N_F^{t2 \{100\}} / N_{iso} = \theta_1 / \theta_3$. Так, например, для MgO имеем $\theta_1/\theta_3 = 4.08$. Для области дефокусировки средняя ПФС N_D^{t2} {100} будет меньше, чем N_{iso} в отношении $N_D^{t2 \{100\}} / N_{iso} = (\pi - 4\theta_1) / (\pi - 4\theta_3)$ (например, для MgO $(\pi - 4\theta_1)/(\pi - 4\theta_3) = 0.6$). Из приведенных выше соотношений следует, что отношение средних ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов будет определяться выражением: $N_{F}^{t^{2} \{100\}} / N_{D}^{t^{2} \{100\}} = \theta_{1} (\pi - 4\theta_{3}) / [(\pi - 4\theta_{1})\theta_{3}]$. Так, например, для кристаллов MgO средняя ПФС для волновых векторов в плоскости {100} в областях фокусировки будет больше, чем для областей дефокусировки, в 6.8 раза. Как видно из таблицы 3.2, для остальных соединений (Fe, Cu, InSb и

Таблица 3.2 – Рассчитанные значения углов $\theta_1^{r^{2}\{100\}}$, $\theta_2^{r^{2}\{100\}}$ и $\theta_3^{r^{2}\{100\}}$ и средняя ПФС в областях фокусировки и дефокусировки медленных поперечных фононов для волновых векторов в плоскости грани куба.

Кристалл	<i>k</i> -1	$\theta_1^{t2\{100\}}$	$ heta_2^{t2\{100\}}$	$ extsf{ heta}_3^{t2\{100\}}$	$\frac{N_F^{t2}}{N_{iso}}$	$\frac{N_D^{t2 \{100\}}}{N_{iso}}$	$\frac{N_F^{t2 \{100\}}}{N_D^{t2 \{100\}}}$
Fe	1.15	33.2°	14.9°	19.5°	1.70	0.46	3.70
Cu	1.12	37.2°	16.6°	26.4°	1.41	0.42	3.36
MgO	0.69	21.2°	10.9°	5.2°	4.08	0.60	6.80
InSb	0.81	30.9°	14.3°	14.9°	2.07	0.47	4.40
GaAs	0.90	28.6°	13.8°	12.0°	2.38	0.50	4.76

GaAs) изменение средней ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов значительно меньше, хотя для них параметр анизотропии k-1 заметно больше, чем в кристаллах MgO. Так, например, в кристаллах Fe и InSb средняя ПФС для волновых векторов в плоскости {100} в областях фокусировки увеличивается только в 3.7 и 4.4 раза, соответственно (см. рисунок 3.2). Можно отметить, что максимальные значения углов θ_1 , θ_2 и θ_3 , а также минимальная анизотропия ПФС имеют место для кристаллов Cu. Аналогично можно рассмотреть фокусировку медленных и быстрых поперечных мод для волновых векторов в плоскости {110} (см. рисунок 3.16). В этой плоскости, в отличие от плоскости {100}, для области дефокусировки средняя ПФС $N_D^{\lambda (110)}$ будет меньше, чем N_{iso} в отношении $N_D^{\lambda (110)}/N_{iso} = (\pi - 2\theta_1)/(\pi - 2\theta_3)$. Вычислим характерные углы θ_1 , θ_2 и θ_3 для мод t_1 и t_2 в плоскости {110} и определим угловые распределения средних ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов в диагональной плоскости (см. таблица 3.3). Как видно из таблицы 3.3, для соединений Fe, Cu, InSb и GaAs изменение средней ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов для плоскости {110} имеет тот же порядок величин, что и в плоскости {100}. Однако в кристаллах MgO для быстрых и

векторов в диагональной плоскости в кристаллах Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs.										
$ extsf{ heta}_{i}^{\lambda \{110\}}$	Fe	Cu	MgO	InSb	GaAs					
$ heta_1^{t2\{110\}}$	27.5°	30.9°	16.0°	25.2°	22.9°					
$\theta_2^{t2\{110\}}$	12.6°	13.8°	8.6°	12.0°	11.5°					
$ heta_3^{t2\{110\}}$	14.3°	19.5°	2.3°	9.7°	8.0°					
$\frac{N_F^{t2}}{N_{iso}}$	1.92	1.58	6.96	2.60	2.86					
$\frac{N_D^{t2 \{110\}}}{N_{iso}}$	0.83	0.84	0.84	0.81	0.82					
$\frac{N_F^{t2 \{110\}}}{N_D^{t2 \{110\}}}$	2.31	1.88	8.29	3.21	3.49					
$ extsf{ heta}_1^{t1\{110\}}$	28.0°	33.3°	7.9°	24.4°	21.4°					
$\theta_2^{t1\{110\}}$	14.9°	16.7°	4.5°	12.9°	11.4°					
$ heta_3^{t1\{110\}}$	8.0°	13.1°	0.1°	5.2°	3.6°					
$\frac{N_{F}^{t1 \{110\}}}{N_{iso}}$	3.50	2.54	79.00	4.69	5.94					
$\frac{N_D^{t1\{110\}}}{N_{iso}}$	0.76	0.74	0.91	0.77	0.79					
$\frac{N_F^{i1\{110\}}}{N_D^{i1\{110\}}}$	4.61	3.43	86.81	6.09	7.52					

Таблица 3.3 – Рассчитанные значения углов $\theta_1^{\lambda\{110\}}$, $\theta_2^{\lambda\{110\}}$, $\theta_3^{\lambda\{110\}}$ и средняя ПФС в областях фокусировки и дефокусировки быстрых и медленных поперечных фононов для волновых векторов в диагональной плоскости в кристациах Fe Cu MgO InSb и GaAs

медленных поперечных фононов средняя плотность состояний в области фокусировки превышает значения для дефокусировки в 87 и 8.3 раза, соответственно. На рисунке 3.3 мы привели угловые зависимости средней ПФС в кристаллах Fe, MgO и InSb. Как мы увидим далее, такое резкое изменение ПФС при переходе от направлений фокусировки t_2 -моды [001] к направлениям дефокусировки [011] может привести к значительному влиянию на теплопроводность и длины пробега фононов рассматриваемых кристаллов в режиме кнудсеновского течения фононного газа.

Рассмотрим фононный транспорт в монокристаллических нанопроводах длиной *L*, с квадратным сечением $D \times D$ при низких температурах, когда теплосопротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Проанализируем анизотропию длин пробега фононов в наноструктурах, когда тепловой поток вращается в плоскости: (1) грани куба YZ {*J*} = {100}, (2) в диагональной плоскости {*J*} = {110}. Для этого воспользуемся выражениями (2.13)-(2.14) для проекций групповых скоростей фононов на направления теплового потока и боковых граней нанопровода. Эти формулы позволяют анализировать особенности фононного транспорта как в нанопроводах, так и в нанопленках при низких температурах. Проанализируем анизотропию теплопроводности и длин свободного пробега фононов для всех акустических мод в спинтронных наноструктурах аналогично тому, как это было сделано в работе [120]. Мы рассчитали угловые зависимости длин пробега фононов в нанопроводах для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости грани куба YZ {*J*} = {110}. Для анизотропию теплопроводности и длин пробега фононов в нанопроводах для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости грани куба YZ {*J*} = {100} или в диагональной плоскости {*J*} = {110}. Для этого было сделано в работе [120]. Мы



Рисунок 3.3 – Угловые зависимости средних ПФС в плоскостях (a) {100} и (б) {110} для быстрых и медленных поперечных фононов в кристаллах Fe (1, 1a), MgO (2, 2a), InSb (3, 3a). Кривые 1, 2, 3 – для медленных поперечных мод, 1a, 2a, 3a – для быстрых поперечных мод. Кривая 4 – плотность фононных состояний для модели изотропной среды.

поляризаций в нанопроводах на основе спин-электронных кристаллов Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs мы получили близкие результаты. В отличие от ранее полученных результатов [120] нами показано, что для всех наноструктур угловые зависимости длин пробега быстрых и медленных *t*мод в плоскостях {100} и {110} хорошо коррелируют с угловыми зависимостями плотности состояний для этих мод (см. рисунок 3.4). Во всех материалах максимальные значения теплопроводности достигаются в направлениях, близких к [100], и обеспечиваются медленной *t*₂-модой. Для наноструктур с большими значениями параметра анизотропии Fe, Cu, InSb и GaAs максимумы длин пробега достигаются как раз при углах $\psi = n\pi/2\pm\theta_3$, которые определяют области фокусировки квазипоперечных мод t_1 и t_2 . Для кристалла MgO с меньшей анизотропией длина пробега достигает максимума в направлениях [100] (см. рисунка 3.4в). Как видно из рисунка 3.4, длины свободного пробега в нанопроводах для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод, а также длину пробега, рассчитанную в модели изотропной среды. Дело в том, что для изотропных сред длины пробега фононов разных поляризаций совпадают и равны средней длине свободного пробега. Они определяются полностью геометрическими параметрами и поэтому являются удобной системой сравнения для длин пробега в упруго анизотропных наноструктурах при изменении направления потока тепла [120]. Напротив, в направлениях дефокусировки они имеют минимальные значения, меньшие, чем в модели изотропной среды (см. рисунок 3.4). Так, например, в направлениях типа [100] фокусируется медленная поперечная мода и длина пробега для Fe и MgO в 2.5 и 3.4 раза больше, чем для продольных фононов и в 2 и 3 раза больше, чем в модели изотропной среды. Напротив, в направлениях типа [100] продольные фононы дефокусируются, поэтому их длина пробега оказывается меньше, чем в изотропной среде в 1.5 и 1.3 раза для нанопроводов из Fe и MgO. Отношения средних длин пробега (теплопроводности) в симметричных направлениях для нанопроводов из спинтронных материалов Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs приведены в таблице 3.4. Максимумы теплопроводности достигаются в направлениях типа [100], а минимумы в направлении [111]. Максимальная анизотропия решеточной теплопроводности 70% достигается для MgO, а минимальная - 40% для нанопроводов из Cu (см. таблицу 3.4). Максимумы теплопроводности во всех материалах обеспечиваются медленной t2-модой. Максимум параметра анизотропии k-1 имеет место для кристаллов Fe, а минимум - для MgO, однако максимальная анизотропия теплопроводности имеет место для *t*₂-моды В MgO. Изоэнергетическая поверхность этой моды в MgO минимальную вогнутость и, соответственно, минимальные значения угла θ_3 (см. таблицу 3.2). Поэтому отношения плотностей фононных состояний *t*₂-моды для областей фокусировки и дефокусировки фононов в плоскости {100} имеет наибольшее значение из рассмотренных кристаллов. В плоскости {110} максимальное значение



Рисунок 3.4 – Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{lI(\psi)l}^{A(J)} = \Lambda_{lI(\psi)l}^{A(J)} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{lI(\psi)l}^{(J)} = \Lambda_{lI(\psi)l}^{(J)} / D$ в Fe (a, б) и MgO (в, г) и InSb (д, е) для образцов с квадратным сечением D = 50 нм и длиной L = 100D в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (a, б) и в диагональной плоскости (в, г). 1 – быстрая t_1 -мода, 2 – медленная t_2 -мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длин свободного пробега. Пунктирная кривая 5 - для изотропной среды ($\Lambda_{iso} = 1.11D$). Штриховые линии 6 и 7 иллюстрируют угловое распределение плотности состояний для медленных и быстрых *t*-мод в плоскостях {100} и {110}.

Таблица 3.4 — Отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях для нанопроводов с квадратным сечением D = 50 нм и длиной L=100D из кристаллов Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs.

	Fe	Cu	MgO	InSb	GaAs
$\Lambda^{\{110\}}_{[100]}$: $\Lambda^{\{110\}}_{[110]}$: $\Lambda^{\{110\}}_{[111]}$	1.48:1.08:1	1.41:1.11:1	1.71:1.14:1	1.59:1.13:1	1.60:1.20:1
$\Lambda^{t2\{100\}}_{[100]}:\Lambda^{t1\{100\}}_{[100]}:\Lambda^{L\{100\}}_{[100]}$	2.50:1.84:1	2.20:1.96:1	3.36:1.51:1	2.68:1.70:1	2.84:1.68:1
$\Lambda_{[110]}^{t1\{100\}}:\Lambda_{[110]}^{L\{100\}}:\Lambda_{[110]}^{t2\{100\}}$	1.53:1.36:1	1.11:1.16:1	2.00:1.35:1	1.78:1.38:1	1.90:1.39:1
$\Lambda^{L\{110\}}_{[111]}:\Lambda^{t2\{110\}}_{[111]}:\Lambda^{t1\{110\}}_{[111]}$	2.06:1.41:1	2.00:1.30:1	1.75:1.62:1	1.94:1.48:1	1.94:1.53:1

отношения плотностей фононных состояний для областей фокусировки и дефокусировки фононов реализуется для быстрой t_1 -моды в очень узком интервале углов вблизи направлений типа [110] в нанопроводах из MgO. Однако этот максимум не оказывает существенного влияния на длины пробега. Отношение $\Lambda_{[110]}^{t1\{110\}} : \Lambda_{[100]}^{t2\{110\}} = 0.62$ оказывается меньше единицы, хотя отношение плотностей состояний для областей фокусировки и дефокусировки t_1 -моды в направлении [110] на порядок величины больше, чем для t_2 -моды в направлении [100] (см. таблицу 3.3).

Из сравнения рисунков 3.3 и 3.4 видно, что угловые зависимости длин пробега квазипоперечных t_1 и t_2 -мод в плоскостях {100} и {110}, как и угловые распределения плотности состояний этих мод, определяются углами $\theta_1^{\lambda\{J\}}$ и $\theta_3^{\lambda\{J\}}$. Отметим, что основное внимание в настоящей работе уделено влиянию фокусировки фононов на ПФС и релаксационные характеристики медленных и быстрых квазипоперечных мод по двум причинам. Во-первых, традиционный анализ влияния фокусировки фононов на распространение фононных мод в упруго анизотропных кристаллах, основанный на «факторе усиления» [12-14], не позволяет сделать количественных оценок ПФС квазипоперечных мод из-за неоднозначной зависимости групповой скорости в области отрицательной кривизны на изоэнергетической поверхности, а также обращения в бесконечность «фактора усиления» в точках нулевой кривизны. Во-вторых, квазипоперечные моды вносят преобладающий вклад в фононную теплопроводность рассматриваемых наноструктур (см. таблицу 3.5). Их вклад в теплопроводность нанопроводов с направлением теплового потока [100] составляет от 93 до 95% полной теплопроводности, а в направлениях [110] и [111] превышают 80 %. При этом вклад моды t₂ в теплопроводность в направлении фокусировки составляет 64 и 68% для кристаллов Fe и MgO, соответственно. Направление [100] соответствует направлению дефокусировки продольных фононов. Их вклад

направлениях	паправлениях (70).														
Направление	Fe			Cu		MgO		InSb			GaAs				
градиента температур	L	t_1	<i>t</i> ₂	L	t_1	<i>t</i> ₂	L	t_1	<i>t</i> ₂	L	t_1	<i>t</i> ₂	L	t_1	t_2
[100]	6	30	64	5	31	64	7	25	68	6	29	65	7	28	65
[110]	14	43	43	11	34	55	15	53	32	13	48	39	14	50	36
[111]	19	25	55	16	25	59	20	27	53	18	27	56	20	26	54

Таблица 3.5 – Вклад колебательных мод в теплопроводность стержней из кристаллов Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs с квадратным сечением D = 50 нм и длиной L=100D в симметричных направлениях (%).

в теплопроводность кристаллов Fe и MgO минимален и составляет 6 и 7%, соответственно (см. таблицу 3.5). В направлениях типа [111] фокусируются продольные фононы, и их вклад в теплопроводность кристаллов Fe и MgO возрастает до 19 и 20%, соответственно. Итак, нами показано, что для всех рассмотренных нанопроводов области максимумов на угловых зависимостях длин пробега быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях {100} и {110} однозначно соответствуют областям фокусировки ПФС для этих мод.

3.2 Влияние фокусировки на длины свободного пробега фононов в пленках в режиме кнудсеновского течения фононного газа

Рассмотрим фононный транспорт в монокристаллических пленках длиной *L*, имеющих прямоугольное сечение, со сторонами *D* (толщина) и $W = \mu D$ (ширина) при низких температурах, когда теплосопротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. При температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), воспользуемся моделью анизотропного континуума [24-25]. Анизотропия теплопроводности и вкладов в неё от акустических мод определяется длинами свободного пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{(J)}$ и $\Lambda_{[I(\psi)]}^{(J)2}$. В системе координат по ребрам куба фазовая скорость $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ определена в первой главе (1.17), Индексы поляризации λ выберем следующим образом: индекс *L* соответствует продольным фононам, t_1 и t_2 – для «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным модам. Длины свободного пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{(J)}$ и $\Lambda_{[I(\psi)]}^{(J)\lambda}$ для направления потока тепла [$I(\psi)$] и ориентации плоскости пленки {*J*} определены в приложении A (1.40)-(1.41). Для анализа влияния фокусировки на распространение фононов в пленках нам необходимо проанализировать распределение длин пробега фононов по углам $\Phi(\theta, \varphi)$ в плоскостях пленок, имеющих различную ориентацию, а также распределение

длин пробега фононов по углам $\Theta(\theta, \varphi)$ в поперечных сечениях пленок, включающих направление теплового потока. Для пленок, имеющих ориентацию {100}, угол $\Phi = \varphi$ и $\Theta = \theta$, а для других ориентаций необходимо переходить в систему координат, связанную с пленкой. Поэтому определим распределение длин пробега фононов по углам в поперечных сечениях пленок и в плоскостях пленок следующим образом:

$$\Lambda_{[I]}^{\lambda\{J\}}(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\Phi \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi), \qquad \Lambda_{[I]}^{\lambda\{J\}}(\Phi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d(\cos\Theta) \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi)$$
(3.1)

Проанализируем зависимости длин пробега фононов в пленках от геометрических и ориентационных параметров, когда тепловой поток вращается в плоскости: (1) грани куба YZ $\{J\}$ = $\{100\}$, (2) в диагональной плоскости $\{J\} = \{110\}$, (3) в плоскости, перпендикулярной диагонали куба $\{J\} = \{111\}$. Ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла определяются через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные тепловому потоку [39].

Определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки (одной из боковых граней наноструктуры), она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно двум другим боковым граням наноструктуры (пленки). Тогда компоненты групповой скорости фононов для рассматриваемых случаев могут быть представлены в виде (2.13)-(2.14), а для плоскости, перпендикулярной диагонали куба $\{J\} = \{111\}$:

$$V_{g3}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} - V_{gy}^{\lambda}\right) \sin \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) / 2 + V_{gz}^{\lambda}\right) \cos \psi,$$

$$V_{g2}^{\lambda} = \left(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) \cos \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) / 2 + V_{gz}^{\lambda}\right) \sin \psi, \qquad V_{g1}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda} + V_{gz}^{\lambda}\right) / \sqrt{3}.$$
(3.2)

Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^{λ} . Проекция групповой скорости V_{g1}^{λ} не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения.

Рассмотрим влияние геометрических параметров на анизотропию теплопроводности и длин свободного пробега фононов в пленках Fe, Cu, MgO, InSb и GaAs. Для этого зафиксируем ширину пленки W = 100 D (µ=100, D=50 нм) и построим их зависимости от приведенной длины $k_0 = L/2D$ для направлений теплового потока, обеспечивающих фокусировку и дефокусировку акустических мод. Ранее нами было показано [36], что длины свободного пробега в объёмных материалах достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов, а минимальных значений - в направлениях дефокусировки. Поэтому, если рассчитанные значения длин свободного пробега для этих направлений будут совпадать, то можно ожидать, что их зависимости в плоскости пленки будут изотропны. Если они будут различаться, то,

соответственно, длины пробега в плоскости пленки будут анизотропны. В пленках с ориентацией {100} медленная мода фокусируется и дефокусируется в направлениях [100] и [110], а для продольных фононов в этих направлениях имеет место дефокусировка и локальный максимум фокусировки, соответственно [39]. Для быстрой и медленной *t*-мод в пленках с ориентацией плоскости {111} локальные максимумы и минимумы фокусировки реализуются в направлениях [112] и [110].

На рисунках 3.5 и 3.6 приведены результаты расчета зависимостей длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{(J)\lambda}(k_0) = \Lambda_{[I(\psi)]}^{(J)\lambda}(k_0)/D$, нормированных на толщину пленки, от приведенной длины k_0 для этих направлений. Из этих рисунков видно, что зависимости длин свободного пробега для различных колебательных мод в пленках Fe и MgO с ориентациями {100} и {111} являются возрастающими функциями длины образца. При *L*>100*W* они выходят на насыщение. При *L*≤*W* зависимости длин свободного пробега в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов для всех акустических мод практически совпадают. Поэтому, следует ожидать, что при *L*≤*W* угловые зависимости длин свободного пробега и полной теплопроводности для пленок с ориентациями {100} и {111} будут изотропны. Однако увеличение длины пленок с ориентациями плоскостей {100} и {111} при *L*>*W* (k_0 >50) приводит к росту анизотропии длин пробега (см. рисунок 3.5), и при *L*>10² *W* анизотропия длин свободного пробега достигает максимальных значений. Для пленок Fe и MgO с ориентацией {100} в направлении фокусировки [100] длины пробега медленной поперечной моды оказываются больше, чем в направлении дефокусировки в 1.24 и



Рисунок 3.5 – Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[I]}^{[100]}(k_0)$ (кривые 1 и 1а), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[I]}^{\lambda\{100\}}(k_0)$ в пленках Fe (а) и MgO (б) с ориентацией {100} от приведенной длины k_0 . Сплошные (1, 2, 3, 4) и пунктирные кривые (1а, 2а, 3а, 4а) рассчитаны для градиентов температуры вдоль направлений [100] и [110], соответственно. Кривые (2, 2а) – для быстрой t_1 -моды, (3, 3а) – для t_2 -моды, (4, 4а) - для продольных фононов, кривая 5-для модели изотропной среды.



Рисунок 3.6 – Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[I]}^{(11)}(k_0)$ (кривые 1 и 1а), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[I]}^{4(11)}(k_0)$ в пленках Fe (а) и MgO (б) с ориентацией {111} от приведенной длины k_0 . Сплошные кривые (1, 2, 3, 4) и пунктирные кривые (1a, 2a, 3a, 4a) рассчитаны для градиента температуры вдоль направлений [112] и [110], соответственно. Кривые (2, 2a) – для быстрой поперечной моды, (3, 3a) – для моды t_2 , (4, 4a) - для продольных фононов, кривая 5-для модели изотропной среды.

1.7 раза, соответственно. Для быстрой поперечной t_1 -моды в пленках Fe при L>100W длины пробега в направлениях [100] оказываются на 4% больше, чем в направлениях [110]. Однако в пленках MgO с ориентацией {100} для t_1 -моды ситуация обратная: длина пробега $\Lambda_{[100]}^{T1\{100\}}$ оказывается в 1.33 раза меньше, чем $\Lambda_{[1^{11}00]}^{T1\{100\}}$ (см. таблицу 3.6). Анизотропия полной теплопроводности в пленках Fe и MgO мала: для направлений [100] в пленках Fe она оказывается на 14% больше, а в пленках MgO на 5% меньше, чем в направлениях [110]. Для быстрой

	Fe	MgO	InSb	Cu	GaAs
$\Lambda^{L\{100\}}_{[110]}$ / $\Lambda^{L\{100\}}_{[100]}$	1.21	1.13	1.18	1.24	1.18
$\Lambda^{L\{111\}}_{[110]}$ / $\Lambda^{L\{111\}}_{[11\overline{2}]}$	1.04	1.01	1.03	1.02	1.04
$\Lambda^{T1\{100\}}_{[110]}$ / $\Lambda^{T1\{100\}}_{[100]}$	1.04	1.33	1.09	0.92	1.02
$\Lambda^{T1\{111\}}_{[110]}$ / $\Lambda^{T1\{111\}}_{[11\overline{2}]}$	1.14	1.16	1.18	1.01	1.27
$\Lambda^{T2\{100\}}_{[100]}$ / $\Lambda^{T2\{100\}}_{[110]}$	1.24	1.68	1.42	1.02	1.54
$\Lambda^{T2\{111\}}_{[11ar 2]}$ / $\Lambda^{T2\{111\}}_{[110]}$	1.09	1.11	1.09	1.08	1.13
$\Lambda^{\{100\}}_{[100]}/\Lambda^{\{100\}}_{[110]}$	1.14	1.05	1.16	1.03	1.21
$\Lambda^{\!\{111\}}_{[110]}/\Lambda^{\!\{111\}}_{[11\overline{2}]}$	1.03	1.05	1.06	0.97	1.08

Таблица 3.6 – Анизотропия длин свободного пробега для длинных пленок (*L*=100*W*, *W* = 100*D*).

поперечной и продольной мод анизотропия длин пробега для пленок Fe в области насыщения имеет меньшие значения: $\Lambda_{[100]}^{(100]T1} : \Lambda_{[100]}^{(100]T1} = 1.04$ и $\Lambda_{[110]}^{(100]L} : \Lambda_{[100]}^{(100]L} = 1.21$. В пленках MgO анизотропия длин пробега продольных мод в области насыщения уменьшается до 13%. Для пленок Cu, InSb и GaAs зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров подобны рассчитанным для пленок Fe и MgO (см. таблицу 3.6). При $L \le W$ эти зависимости в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов для каждой колебательной моды практически совпадают. А при L > 100W они также выходят на насыщение. Параметры анизотропии длин пробега для всех пленок приведены в Таблице 3.6.

3.3 Особенности фокусировки фононов и анизотропии теплопроводности в квадратных и длинных пленках

В этом разделе проанализируем угловые зависимости теплопроводности и длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{[I]\lambda}(k_0)$ при вращении градиента температуры в плоскостях пленок. Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию длин пробега фононов в квадратных пленках (*L*=*W*) с различными ориентациями плоскостей. Проведем анализ физических причин, приводящих к изменению анизотропии длин пробега фононов при переходе к длинным пленкам *L>>W*. Угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{[I]\lambda}(k_0)$ в упруго анизотропных наноструктурах сравним с результатами, следующими из модели изотропной среды. В изотропных средах длины пробега фононов разных поляризаций совпадают и равны средней длине свободного пробега Λ_{iso} . Они определяются полностью геометрическими параметрами и поэтому являются удобной системой сравнения для длин пробега в упруго анизотропных наноструктурах при изменении ориентации плоскости пленки или направления потока тепла [113].

При сравнении угловых зависимостей длин свободного пробега фононов для пленок Fe и MgO с различными ориентациями плоскостей обращает на себя внимание, следующие особенности (см. рисунок 3.7). Во-первых, теплопроводность и средние длины пробега фононов в квадратных пленках (L=W) с ориентациями плоскостей {100} и {111} являются изотропными, а для пленок с ориентацией {110} они имеют эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления [100]. Во-вторых, теплопроводность пленок Fe и MgO с ориентациями плоскостей {100} более, чем в два раза превосходит значения для ориентаций {111}. Далее мы проанализируем физические причины, которые обуславливают зависимость величин теплопроводности от ориентации плоскостей пленок. Будет показано, что отмеченные выше



Рисунок 3.7 – Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{J\}}$, нормированных на толщину пленки *D*, для пленок Fe {(a), (б) и (в)} и MgO {(г), (д) и (е)} длиной *L*=*W* = 100*D* (*D*=50 нм) для случаев, когда градиент температур вращается в плоскости пленки {100} (а) и (г), {110} (б) и (д), {111} (в) и (е). Кривые 1 – для быстрой поперечной моды, 2 – для медленной *t*₂-моды, 3 – для продольной моды, 4 – для средней длины свободного пробега, 5 - для длины свободного пробега в модели изотропной среды.

особенности обусловлены влиянием фокусировки фононов на распространения фононных мод в монокристаллических пленках в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Согласно теории Казимира – МакКарди [10, 11] все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца. Поэтому в каждой точке поверхности независимо от её ориентации и параметров анизотропии фононы всех поляризаций рассеиваются диффузно. Поэтому, казалось бы, теплопроводность пленок не должна зависеть от ориентации плоскостей пленок. Далее мы покажем, что эти эффекты обусловлены влиянием упругой анизотропии на распространение акустических мод в квадратных пленках, имеющих различную ориентацию. Для пленок с плоскостью {100} медленная квазипоперечная мода *t*₂ фокусируется и дефокусируется в направлениях [100] и [110], соответственно. Для продольных фононов в этих направлениях происходит дефокусировка и локальный максимум фокусировки, соответственно. Угол между этими направлениями

99

составляет $\Delta \phi = \pi/4$. В пленках с плоскостью {111} угол между направлениями фокусировки [110] и дефокусировки [11 $\overline{2}$] для моды t_2 и продольных фононов составляет $\Delta \phi = \pi/6$.

Найдем актуальный интервал углов, который определяет основной вклад в длины пробега при усреднении по углам Ф в плоскости пленки. Для этого в формулах (3.1) проведем усреднение по поперечному сечению пленки и построим зависимости длин пробега $\Lambda_{[I(w)]}^{\lambda \{J\}}(\Phi)$ от угла Ф. Анализ показал, что для пленок Fe и MgO этот интервал составляет $\Delta \Phi \approx \pi/2$, а для некоторых мод несколько превышает это значение. Поэтому для произвольного направления потока тепла область усреднения захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Неудивительно, что после усреднения по углам Ф для квадратных пленок с ориентациями {100} и {111} длины пробега становятся изотропными (см. рисунок 3.7). Для пленок Fe и MgO с ориентациями {100} средние длины пробега превосходят значения для модели изотропной среды в 1.72 и 2.24 раза, соответственно. В то же время для пленок Fe и MgO с

Таблица 3.7 – Вклады колебательных мод в теплопроводность для различных направлений и ориентаций плоскостей квадратных пленок (*L*=*W*=100*D*) (в %).

Ориентация	Fe			MgO		Cu		InSb			GaAs				
плоскости пленки и															
направление	I	<i>t</i> 1	<i>t</i> ₂	Ţ	t1	to	I	t1	<i>t</i> ₂	L	t_1	<i>t</i> ₂	L	<i>t</i> ₁	to
градиента	L	l ₁		L	ι	L2	L	ι							ι
температур															
{100}	5	37	58	6	57	37	4	29	67	5	43	52	5	47	48
{110}[100]	10	21	69	10	18	72	8	22	70	9	20	71	10	20	70
{110}[110]	24	29	47	23	30	47	20	28	52	22	31	47	23	30	47
{111}	18	43	39	20	46	34	13	37	50	17	46	37	19	46	35

ориентацией {111} средние длины свободного пробега становятся меньше в 1.2 и 1.1 раза, чем Λ_{iso} . В результате теплопроводность пленок Fe и MgO с ориентацией {100} оказывается больше в 2 и 2.4 раза, чем для пленок с ориентацией {111}. Для пленок Cu, InSb и GaAs с ориентацией {100} теплопроводность оказывается больше в 1.8, 2.2 и 2.2 раза, чем для ориентации {111}. Основной вклад в решеточную теплопроводность рассматриваемых пленок с ориентациями {100} и {111} вносят поперечные фононы (см. таблицу 3.7). Так, например, для пленок Fe и MgO он составляет 95 и 94% для направления [100] и 82 и 80% для направления [111] (см. таблицу 3.7). Следует отметить, что в пленках с ориентацией {100} длины пробега для поперечных мод

Соеди-	$\boldsymbol{\Lambda}^{L\{110\}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{L\{111\}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{L\{110\}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{L\{100\}}$	$\Lambda^{T1\{100\}} \cdot \Lambda^{T1\{111\}} \cdot \Lambda^{T1\{110\}} \cdot \Lambda^{T1\{110\}}$	$\Lambda^{T2\{100\}} \cdot \Lambda^{T2\{110\}} \cdot \Lambda^{T2\{110\}} \cdot \Lambda^{T2\{110\}}$	$\lambda^{100} \cdot \lambda^{110} \cdot \lambda^{110} \cdot \lambda^{111}$
нение		[100] · · · [110] · · · [110] · · · [100]		
Fe	2.42:1.76:1.28:1	2.59:1.51:1.05:1	2.92:2.37:1.24:1	1.99:1.35:1.03:1
Cu	2.58:1.78:1.30:1	1.96:1.37:1.00:1	2.39:1.66:0.99:1	1.80:1.20:0.96:1
MgO	1.76:1.50:1.15:1	4.78:1.59:1.10:1	2.70:3.40:1.46:1	2.43:1.58:1.05:1
InSb	2.06:1.62:1.20:1	3.20:1.59:1.09:1	3.09:2.75:1.33:1	2.17:1.42:1.02:1
GaAs	2.06:1.63:1.21:1	3.64:1.62:1.09:1	3.01:2.90:1.37:1	2.20:1.44:1.03:1

Таблица 3.8 – Отношения длин свободного пробега в симметричных направлениях для квадратных пленок.

оказываются существенно больше, а для продольных фононов заметно меньше, чем в модели изотропной среды. Так, например, для пленок Fe и MgO для отношения длин пробега соответственно имеем: $\Lambda_{1100/2}^{(100)/2} : \Lambda_{1100/2}^{(100)/2} : \Lambda_{110/2}^{(100)/2} : \Lambda_{11$

Другая ситуация складывается для потока тепла в пленке с ориентацией {110}, где зависимости теплопроводности и средней длины пробега имеют эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления [100]. Как видно из рисунка 3.7, эта зависимость обусловлена t_2 -модой, которая для пленок с плоскостью {110} фокусируется и дефокусируется в направлениях [100] и [110], соответственно. Угол между этими направлениями составляет $\Delta \Phi = 90^{0}$. Этот угол оказывается слишком велик, чтобы при усреднении по углу Φ в плоскости пленки полностью размыть эффект фокусировки, в отличие от пленок с плоскостями {100} и {111}. Поэтому при усреднении по угля Φ в плоскость не усредняется, и теплопроводность в плоскости пленки $J = \{110\}$ становится анизотропной, как и вклады t_2 -моды и продольных фононов (см. рисунок 3.7). Для медленной t_2 -моды длины пробега в пленках Fe и MgO в направления [100] оказываются в 1.5 и 2.3 раза больше, чем в модели изотропной среды. Однако в направлениях дефокусировки они становятся заметно меньше, чем в изотропных средах (см. таблицу 3.8). Для продольных фононов имеем обратную ситуацию: для них длины пробега в пленках Fe и MgO в направления [100] оказываются в 1.7 и 1.4 раза больше, а в направлении [100] - в 1.1 меньше, чем в модели изотропной среды. Однако ввиду малой по



Рисунок 3.8 – Угловые зависимости длин свободного пробега в длинных пленках Fe с ориентацией {100} (a), {111} (б) и MgO с ориентацией {100} (в) и {111} (г) для $L=100W=10^4D$ (D=50 нм): кривые 1 – для быстрой поперечной моды, 2 – для моды t_2 , 3 - для продольных фононов, 4 – средняя длина свободного пробега, 5 - для модели изотропной среды.

сравнению с поперечными фононами плотности состояний (см. таблицу 3.7) их вклад недостаточен, чтобы кардинально изменить вид полной теплопроводности для рассматриваемых материалов.

Проведенный с использованием формул (3.1) анализ показал, что с увеличением длины пленок с ориентациями {100} и {111} интервалы углов, которые определяют основной вклад при усреднении в длины пробега, значительно сужаются. Поэтому при переходе к длинным пленкам L >> W усреднение по углам Ф в плоскостях этих пленок оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов. В результате длины пробега в пленках с ориентациями {100} и {111} становятся анизотропными (см. рисунки 3.8 (а) и (б)). Как видно из

102

рисунков 3.8, основной вклад в анизотропию теплопроводности и средней длины пробега фононов в пленках Fe вносит медленная t_2 -мода, которая фокусируется в направлениях [100]. Однако в этих направлениях длина пробега $\Lambda_{(100)^2}^{(100)/2}$ имеет локальные минимумы и её величины оказываются на 20% меньше, чем при углах $\Psi = n\pi/2 \pm \theta_3$ (см. рисунки 3.8а). В направлениях [100] длина пробега $\Lambda_{(100)^2}^{(100)/2}$ оказывается на 22% больше, чем в направлениях [110]. Анизотропия теплопроводности и средней длины пробега для длинных пленок (L>>W) оказывается несколько меньше: отношение $\Lambda_{(100)}^{(100)}$: $\Lambda_{(110)}^{(100)} = 1.14$. Значения параметров анизотропии для теплопроводности и средних длин пробега пленок из остальных спинтронных материалах приведены в таблице 3.8. Отметим, что в длинных пленках Fe с ориентацией {100} средняя длина пробега фононов оказывается больше, а для ориентации {111} - меньше, чем в модели изотропной среды. При этом основной вклад в анизотропию теплопроводности вносит быстрая поперечная мода (см. рисунок 3.8(6), кривая 1), которая фокусируется в направлениях [110]. Для неё длина пробега оказывается на 14% больше, чем в направлениях типа [112]. Анизотропия теплопроводности и средней длины пробега в длинных пленках с ориентацией {111} уменьшается до 5%.

Рассмотрим особенности распространения фононных мод в квадратных пленках (L=W) и покажем, что теплопроводность (и средние длины пробега) в пленках с ориентацией {100} имеют большие значения, чем для пленок с ориентацией {111}. Для этого усредним длины пробега по углам Φ в плоскостях пленок, согласно формулам (3.1), и построим их зависимости от угла Θ в поперечном сечении пленки, которое включает направление теплового потока (см. рисунок 3.9а). Как видно из рисунка 3.9а, для поперечных фононов в пленках с ориентацией {100} преобладает эффект фокусировки, и усредненные по углам Φ длины пробега $\Lambda_{[001]}^{t1\{100\}}(\Theta)$ и $\Lambda_{[001]}^{t2\{100\}}(\Theta)$ при всех углах Θ оказываются больше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, тогда как для продольных фононов – наоборот: для них длины пробега при всех углах оказываются меньше, чем Λ_{iso} . Следует отметить, что распределение длин пробега по поперечному сечению пленки, приведенное на рисунке 3.9, построено в пространстве волновых векторов. В координатном пространстве (или пространстве групповых скоростей) боковые пики $\tilde{\Lambda}^{t2\{100\}}_{[I(\psi)]}(\Theta)$, соответствуют волновым векторам с углами $\pm \theta_1^{\prime 2}$ для медленной поперечной моды [36]. Из-за эффекта фокусировки фононы этой моды будут распространяться в направлении [100] (см. рисунок 3.10), т.е. боковые максимумы перейдут в центральный пик, соответствующий направлению градиента температуры (см. рисунок 3.96). Аналогичным образом можно интерпретировать боковые максимумы на кривой $\tilde{\Lambda}_{11001}^{t1\{100\}}(\Theta)$ для быстрой t_{l} -моды, которая фокусируется в направлении [110] для волновых

векторов в плоскости {110}. Из рисунка 3.96 следует, что основной вклад в длины пробега поперечных мод в координатном представлении будут вносить фононы распостроняющиеся в области углов, ограниченные величинами $\pi / 2 \pm \theta_3^{t2}$ и $\pi / 2 \pm \theta_3^{t1}$ для медленных и быстрых *t*-мод, соответственно. Таким образом, распределение длин пробега для этих мод в координатном пространстве будет иметь однопиковый вид (как и для изотропной среды) с характерными ширинами распределения $2\theta_3^{t1}$ и $2\theta_3^{t2}$, соответственно.

Для квадратных пленок с ориентацией плоскости {111} зависимости длин пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{100\}}(\Theta)$ для всех акустических мод существенно изменяются. Центральный максимум сохраняется только для изотропной среды $\Lambda_{iso}(\Theta)$, а для всех акустических мод длины пробега



Рисунок 3.9 – (а) Распределение длин пробега $\tilde{\Lambda}_{L^{I}(W)}^{A(L)}(\Theta)$ в поперечном сечении для пленок Fe с ориентациями {100} (кривые 1, 2, 3) и {111} (кривые 1а, 2а, 3а) и длиной L=W=100D: кривые 1, 1а- для моды t_1 , кривые 2, 2а - для t_2 -моды, кривые 3, 3а - для продольных фононов, кривая 4 - для модели изотропной среды. (б) Фокусировка медленных поперечных мод в кристаллах Fe для сечений изоэнергетической поверхности плоскостью XZ Стрелками изображены волновые векторы внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её.



Рисунок 3.10 – Иллюстрация распространения фононов в осевом сечении пленки Fe с ориентацией {100} и направлением градиента температур [100] для волновых векторов с углами $\theta = \theta_1^{\prime 2} = 33.2$, $\theta = \theta_2^{\prime 2} = 14.9^{\circ}$ и $\theta = \theta_3^{\prime 2} = 19.5^{\circ}$ L – длина пленки, D – ее толщина.

 $\Lambda^{\lambda\{100\}}_{II(\mu\nu)}(\Theta)$ в пленках Fe в окрестности направления теплового потока (оси пленки) имеют плавные минимумы (см. рисунок 3.9а). Это означает, что для всех мод в направлениях, близких к направлению теплового потока, преобладают эффекты дефокусировки, в отличие от пленок с ориентацией {100}. Причем длины пробега $\Lambda_{\{111\}}^{\prime 2}(\Theta)$ почти во всем интервале углов θ оказываются меньше, чем $\Lambda_{iso}(\Theta)$, за исключением узких интервалов $84^{\circ} < \Theta < 86^{\circ}$ и $94^{\circ} < \Theta < 96^{\circ}$, где они имеют локальные максимумы. Очевидно, что среднее значение $\Lambda_{(111)}^{t^2}$ будет меньше, чем Λ_{iso} . Для быстрой поперечной и продольной мод интервалы углов Θ , где $\Lambda_{II(\mu)}^{\lambda[111]}(\Theta) > \Lambda_{iso}(\Theta)$ значительно шире, поэтому средние значения для них будут больше, чем Л_{iso} (см. рисунки 3.7 и 3.9а). Как уже отмечалось, вклад продольных фононов в теплопроводность и среднюю длину пробега в пленках для рассматриваемых материалов мал по сравнению с вкладом поперечных фононов. Так, например, для пленок Fe с ориентациями плоскостей {100} и {111} он составляет 5 и 18%, соответственно (см. таблицу 3.7). С другой стороны, вклады поперечных мод в теплопроводность пленок Fe существенно больше (см. таблицу 3.7). Поскольку длины пробега обеих поперечных мод в пленках с ориентацией $\{100\}$ значительно превышают Λ_{iso} , а в пленках с ориентацией {111} длина пробега $\Lambda^{t^{2\{111\}}} < \Lambda_{iso}$, то в квадратных пленках с ориентацией {100} теплопроводность и средняя длина пробега фононов имеют большие значения, чем для пленок с ориентацией {111}: для MgO, Fe, InSb и GaAs в 2.4, 2, 2.2, 2.2 раза, соответственно (см. рисунок 3.7). Таким образом, этот результат обусловлен тем, что для медленной поперечной моды в пленках с ориентацией {100} преобладают эффекты фокусировки, тогда как в пленках с ориентацией {111} – эффекты дефокусировки фононов.

Из работ Фукса, Зондгеймера [32, 121] известно, что при достаточно низких температурах теплосопротивление пленок определяется главным образом рассеянием фононов на плоскостях пленок. В ряде работ для характеристики теплопроводности пленок при диффузном рассеянии

фононов на границах использован термин «рассеивающая способность» плоскостей пленок с различной ориентацией (см., например, [122]). Следует отметить, что использование этого термина для характеристики влияния фокусировки фононов на теплопроводность пленок является физически некорректным. Дело в том, что в теории Казимира предполагается, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца. Поэтому в каждой точке поверхности независимо от её ориентации и параметров анизотропии k-1 фононы всех поляризаций рассеиваются диффузно. Таким образом, рассеивающая способность или интенсивность рассеяния пленок с различной ориентацией плоскостей одинакова. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность пленок связано с отличием направления волнового вектора от направления распространения фононов и обусловлено упругой анизотропией кристаллов. Если направление теплового потока и ось пленки совпадает с направлением фокусировки одной из мод, то направления распространения фононов этой моды будут отклоняться от плоскостей пленки к её оси и длина пробега этих фононов будет возрастать, как это имеет место для поперечных фононов в пленках с ориентацией {100} и направлением потока тепла [100] (см. рисунок 3.10). Причем фононы t_2 -моды с волновым вектором \mathbf{q}_1 и углом $\theta = -\theta_1$ будут распространяться в направлении [100] (см. рисунок 3.10). А фононы с волновым вектором q_2 и углом $\theta = -\theta_2^{\prime 2}$ будут распространяться под углом $\theta = +\theta_3^{\prime 2}$ (см. рисунки 3.9а и 3.10). Поскольку для Fe угол $\theta_3^{t^2} = 19.5^\circ$, $\theta_2^{t^2} = 14.9^\circ$, то длина свободного пробега $\Lambda_{[100]}^{t_2\{100\}}(\theta_3^{t^2})$ будет меньше, чем в модели изотропной среды $\Lambda_{iso}(\theta_2)$ (см. рисунок 3.10). Для быстрой поперечной моды в плоскости грани куба спектр фононов изотропен и эффект фокусировки отсутствует. Поэтому, как видно из рисунка 3.10, направление волнового вектора q₂ совпадает с направлением групповой скорости $\mathbf{V}_{g}^{t1}(\mathbf{q}_{2})$, и, соответственно, длина пробега $\Lambda_{[100]}^{t1[100]}(\theta_{2}) = \Lambda_{iso}(\theta_{2})$. Если направления теплового потока, оси пленки и дефокусировки одной из мод совпадают, то фононы этой моды будут отклоняться от оси пленки к её плоскостям. Естественно, что длина пробега этих фононов будет уменьшаться. Это имеет место для продольных фононов с волновым вектором q1, для которых угол распространения, определяемый направлением групповой скорости, становится больше, чем угол θ_1 . И, соответственно, длина пробега $\Lambda_{11001}^{L[100]}(\theta_1)$ становится меньше, чем $\Lambda_{iso}(\theta_1)$ (см. рисунок 3.10).

Итак, мы наглядно показали, что влияние фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности пленок, имеющих различную ориентацию, обусловлено не «рассеивающей способностью» плоскостей пленок, а влиянием упругой анизотропии кристаллов на распространение фононных мод в пленках конечных размеров.

3.4 Анизотропия теплопроводности в гетероструктурах GaAs/AlGaAs

При низких температурах для анализа влияния фокусировки на распространение и релаксацию фононов в монокристаллах GaAs воспользуемся моделью анизотропного континуума [24-25]. Ранее в работах [36, 39] проведены детальные расчеты теплопроводности и длин свободного пробега фононов в кристаллах Si и показано, что при низких температурах они согласуются с результатами [15] в пределах погрешности эксперимента. Поэтому при анализе анизотропии длин свободного пробега фононов в кристаллах GaAs мы будем рассматривать кристаллы Si как систему сравнения. Следует отметить, что величины упругих модулей с_{ii} в кристаллах GaAs несколько меньше, чем в Si, а их плотность в 2.3 раза больше, чем в Si (см. таблицу 3.9). Модули упругости второго порядка для GaAs при комнатной температуре были измерены в работе [64]. Позднее в работе [123] были проведены измерения при температуре 77 К и при анализе кинетических явлений они были экстраполированы на Т=0 К. Поскольку в [124] теплопроводность измеряли в интервале от 0.2 до 1 К, то мы будем использовать значения, экстраполированные на Т=0 К (см. таблицу 3.9). В работе [35] было показано, что анизотропия спектра фононов определяется параметром k-1 ($k-1 = (c_{12}+2c_{44}-c_{11})/(c_{11}-c_{44})$, c_{ij} – упругие модули второго порядка). При T=0 К параметр k-1 равен 0.87, что заметно больше, чем в Si (см. таблицу 3.9).

Для кристаллов GaAs и Si наиболее анизотропной является медленная t_2 -мода. Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере этой моды. Построим для неё изоэнергетическую поверхность (см. рисунок 3.11). Направление групповой скорости фонона (1.26), определяющее направление переноса энергии, перпендикулярно этой поверхности. Из рисунка 3.11 видно, что фокусировка фононов характеризуется углами θ_1 - θ_4 (см. подробнее [38, 73, 75]). В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора

Таблица 3.9 – Упругие модули второго порядка c_{ij} (10¹² дин/см²), плотность ρ (гр/см³), углы $\theta_1^{r2(100)}$, $\theta_2^{r2(100)}$, $\theta_3^{r2(100)}$, $\theta_4^{r2(100)}$ для кристаллов GaAs [123] и Si.

Соединение	<i>c</i> ₁₁	<i>C</i> ₁₂	C 44	k-1	ρ	$\theta_1^{t2\{100\}}$	$ heta_2^{t2\{100\}}$	$ extsf{ heta}_{3}^{t2\{100\}}$	$ heta_4^{t2\{100\}}$
GaAs	1.226	0.571	0.60	0.87	5.36	32.4°	13.7°	12.5°	32.4°
Si	1.677	0.65	0.804	0.67	2.33	23.6°	11.9°	6.8°	28.6°



Рисунок 3.11 – Сечение изоэнергетической поверхности плоскостью XZ в кристалле GaAs для медленной *t*₂-моды. Стрелками изображены волновые векторы внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне её.

совпадают, поэтому фононы, распространяющиеся в изотропной среде в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$, в кристаллах GaAs будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ (см. рисунок 3.11). Таким образом, ПФС для t_2 -моды в направлениях фокусировки близких к [100] существенно возрастает по сравнению с изотропной средой. Оценим влияние фокусировки на плотность фононных состояний (ПФС), аналогично тому, как это сделано в [75] (см. также [38]). Как видно из таблицы 3.9, увеличение параметра анизотропии k-1 в кристаллах GaAs, по сравнению Si, приводит к увеличению углов θ_3 и θ_4 в 1.84 и 1.13. Увеличение угла θ_3 для GaAs, по сравнению Si, приводит к увеличению области фокусировки медленной поперечной моды, вовторых, к уменьшению ПФС в этой области относительно кристаллов Si. Расчет ПФС t_2 -моды для GaAs показали, что в области фокусировки в 2.6 раза меньше (см. рисунок 3.12). В результате ПФС t_2 -моды в области фокусировки оказывается в 6.7 раза больше, чем в области дефокусировки. Как видно из рисунка 3.12, в кристаллах Si это отношение равно 9.9. Аналогично можно показать, что продольные фононы фокусируются в направлении [111], а быстрая поперечная мода – в направлении [110] (см. [38]).

Проанализируем анизотропию теплопроводности образцов GaAs тех же геометрических размеров, что и в работе [36] для образцов Si, чтобы иметь возможность сравнить результаты

108


Рисунок 3.12 – Угловые зависимости средних плотностей фононных состояний моды *t*₂ для волновых векторов в плоскости {100} в кристаллах Si кривая 1, GaAs кривая 2, изотропная среда кривая 3

расчета с экспериментальными данными. Рассмотрим стержень GaAs с квадратным сечением D = 0.293 см и длиной L = 2.9 см. Анизотропия теплопроводности и вкладов в неё от колебательных мод определяются длинами свободного пробега $\Lambda^{\{J\}}_{[I(\psi)]}$ и $\Lambda^{\{J\}\lambda}_{[I(\psi)]}$. Мы рассчитали угловые зависимости длин пробега фононов для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости грани куба YZ $\{J\} = \{100\}$ или в диагональной плоскости $\{J\} = \{110\}$. Для анизотропии теплопроводности и средних длин пробега в кристаллах GaAs и Si мы получили близкие $\widetilde{\Lambda}_{\text{[100]}}^{(100]}: \widetilde{\Lambda}_{\text{[110]}}^{(100]}: \widetilde{\Lambda}_{\text{[111]}}^{(110]} = 1.45: 1.07: 1,$ в кристаллах результаты: в кристаллах GaAs Si $\tilde{\Lambda}_{_{[100]}}^{_{\{100\}}}: \tilde{\Lambda}_{_{[111]}}^{_{\{110\}}}: \tilde{\Lambda}_{_{[111]}}^{_{\{110\}}}=1.50: 1.08: 1$ (см. рисунок 3.13). Отметим, что для кристаллов Si результаты расчета в симметричных направлениях [36] хорошо согласуются с экспериментальными данными [15]. Как видно из рисунка 3.13, для образцов с квадратным сечением длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды в кристаллах GaAs и Si достигают максимальных значений в направлениях фокусировки, превосходя длины пробега фононов остальных колебательных мод. Так, например, в кристаллах GaAs для отношения длин пробега имеем: в направлениях типа [100] $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t^2}$: $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t^1}$: $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t^1}$ =2.32:1.67:1, в направлениях типа [111] (см. рисунок 3.13). Качественно подобные результаты получаются и для кристаллов Si: в

направлениях типа [100] $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t^2}$: $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t^1}$: $\Lambda_{[100]}^{\{100\}L}$ =2.33:1.46:1, в направлениях типа [111] $\Lambda_{[111]}^{\{110\}L}$: $\Lambda_{[111]}^{\{110\}t^2}$: $\Lambda_{[111]}^{\{110\}t^1}$ = 1.56:1.35:1, а в направлениях типа [110] $\Lambda_{[110]}^{\{100\}t^1}$: $\Lambda_{[110]}^{\{100\}t^2}$ = 1.50:1.27:1.

Из приведенных выше результатов следует, что анизотропия теплопроводности в кристаллах GaAs, как и в Si, в режиме граничного рассеяния обусловлена, главным образом, медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении [100] и обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении. Её вклад составляет 63 и 61% для кристаллов GaAs и Si, соответственно. Направление [100] соответствует направлению дефокусировки продольных фононов. Их вклад в теплопроводность кристаллов GaAs и Si минимален и составляет 7 и 8%, соответственно. В направлениях типа [111] фокусируются продольные



Рисунок 3.13 – Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов $\widetilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} / D$ и $\widetilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} / D$ в GaAs (*a*) и Si (*б*) для образцов с квадратным сечением D = 0.293 см и длиной L = 2.9 см в случаях, когда градиент температуры вращается в диагональной плоскости: 1 – быстрая t_1 -мода, 2 – медленная t_2 -мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длина свободного пробега. Пунктирная кривая 5 - для изотропной среды ($\Lambda_{iso}=1.12D$). Точки – экспериментальные значения длины пробега для Si [15].

фононы, и их вклад в теплопроводность кристаллов GaAs и Si возрастает более чем в 2 раза и составляет 18 и 19%, соответственно. Таким образом, поперечные фононы вносят преобладающий вклад в теплопроводность этих кристаллов.

В работе [124] были измерены температурные зависимости теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs в интервале от 0.2 до 1 К (см. рисунок 3.14). Подложки GaAs имели прямоугольную форму с геометрическими размерами: для первого образца с 9.5*4*0.4 мм,

ориентацией плоскости гетероструктуры {100} и направлением потока тепла [100], для второго образца 9.5*4.5*0.4 мм, ориентацией плоскости гетероструктуры {110} и направлением теплового потока [110]. Анализ теплопроводности в трехмодовой модели Каллавея [36, 37, 39] показал, что в интервале от 0.2 до 1 К ангармонические процессы рассеяния выморожены, вклад в теплосопротивление от рассеяния на изотопическом беспорядке мал и составляет менее 0.2 %. Согласно [124] в интервале (0.2 - 0.8) К теплопроводность следует зависимости T^3 , что соответствует преобладающей роли граничного рассеяния фононов. При более высоких температурах (0.8 – 1) К степень температурной зависимости уменьшается, и экспериментальные зависимости для гетероструктур с различными ориентациями начинают сближаться (см. рисунок 3.14). Таким образом, в интервале от 0.2 до 0.8 К в гетероструктурах GaAs реализуется случай



Рисунок 3.14 – Температурные зависимости теплопроводности гетероструктур GaAs с ориентациями плоскостей {100} и {110}: кривая 1 - $\kappa^{[100]}=9.4T^3$, кривая 2 - $\kappa^{[110]}=4.9T^3$, кривые 3 и 4 - рассчитанные при полностью диффузном рассеянии для направления [100] и [110]. Символы – экспериментальные значения теплопроводности [124].

кнудсеновского течения фононного газа. Оценки показывают, что в этом режиме теплопроводность для ориентации плоскости {100} оказывается в 1.9 раза больше, чем для ориентации {110}. Единственным подгоночным параметром теории является параметр зеркальности. В отличие от объёмных образцов, где можно обеспечить диффузный характер рассеяния фононов на границах путем обработки поверхности образца наждаком (см. [15]), для нано и гетероструктур такая обработка невозможна. Поэтому мы учтём частичную зеркальность рассеяния фононов обычным образом [21,31]:

$$\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = C_V(T) \ \bar{S} \ \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} / 3 = \sum_{\lambda} C_V^{\lambda}(T) \ \bar{S}^{\lambda} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} / 3, \ \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} [(1+P)/(1-P)]$$
(3.3)

где P - фактор зеркальности, $\Lambda_{[I(\psi)]}^{[J]}$ - длина свободного пробега фононов при диффузном отражении от границ гетероструктуры, ориентационные параметры [I] и {J} характеризуют зависимости теплопроводности и длин пробега от направления теплового потока [I] и ориентации плоскости гетероструктуры {J}. Как видно из рисунка 3.13, при учете факторов зеркальности $P_I = 0.37$ для первой гетероструктуры и $P_2 = 0.29$ - для второй результаты расчета теплопроводности в низкотемпературной области хорошо согласуются с экспериментальными данными [124]. Поскольку параметры зеркальности для гетероструктур имеют различные значения, то отношение величин теплопроводности зависит не только от отношения длин свободного пробега фононов при диффузном отражении от границ, но и значений параметров зеркальности:

$$\kappa_{[100]}^{\{100\}}(T) / \kappa_{[110]}^{\{110\}}(T) = \tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}} / \tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}} = \frac{1+P_1}{(1-P_1)} \Lambda_{[100]}^{\{100\}} / \left\{ \frac{1-P_2}{(1+P_2)} \Lambda_{[110]}^{\{110\}} \right\}.$$
(3.4)

Отношение параметров зеркальности дает коэффициент 1.2, т.е. за счет различия параметров зеркальности гетероструктур на 20% увеличивается различие их теплопроводности. При полностью диффузном отражении фононов от границ гетероструктур с ориентацией плоскостей {100} и {110}, их теплопроводности отличались бы 1.6 раза, а не в 1.9 раза, как имело место в эксперименте [124].

Проанализируем угловые зависимости теплопроводности гетероструктур аналогично тому, как это сделано в работе [40]. Рассмотрим вращение теплового потока в плоскости гетероструктуры для двух случаев: (1) плоскость гетероструктуры имеет ориентацию $\{J\} = \{100\}, (2)$ плоскость гетероструктуры совпадает с диагональной плоскостью $\{J\} = \{110\}$. Тогда компоненты групповой скорости фононов для рассматриваемых случаев могут быть представлены в виде (2.13а)- (2.13б) (см. [40]). Рассмотрим угловые зависимости длин свободного пробега в гетероструктуре GaAs с ориентацией $\{100\}$. Как видно из рисунка 3.15а, анизотропия теплопроводности и вкладов в неё от фононов различных поляризаций мала. В режиме кнудсеновского течения фононного газа она обусловлена медленной t_2 -модой, которая

фокусируется в направлении [100] и превышает значение в направлении дефокусировки [110] на 17 % (см. рисунок 3.15а, кривая 2). Анизотропия вклада быстрой t_1 -моды мала: её значение в направлении [110] на 3% превосходит величину в [100]. Анизотропия вклада продольных фононов также мала: её значение в направлении [110] на 10% превосходит величину в [100]. Поскольку максимумы вклада t_2 -моды соответствуют минимумам вкладов быстрой t_1 -моды и продольных фононов, то происходит частичная компенсация вкладов. В результате анизотропия полной теплопроводности гетероструктуры GaAs с ориентацией {100} в режиме кнудсеновского течения фононного газа уменьшается до 7% (см. рисунок 3.15а, кривая 5). Следует отметить, что мода t_2 вносит преобладающий вклад в теплопроводность гетероструктуры GaAs с ориентацией {100}: он составляет 56 и 46% для направлений [100] и [110], соответственно. Вклад продольных фононов существенно меньше: он составляет 8% для направления [110] и уменьшается до 7% для направления дефокусировки [100] (см. рисунок 3.15а, кривая 3). При полностью диффузном



Рисунок 3.15 – Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов $\widetilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} / D$ и $\widetilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} / D$ для гетероструктур GaAs с ориентациями плоскостей (а) -{100} и (б) -{110}. Кривая 1 – для быстрой поперечной моды, кривая 2 – для медленной поперечной моды, кривая 3 – для продольной моды, кривая 4 – средняя длина свободного пробега. Кривая 5 – средняя длина свободного пробега для полностью диффузного рассеяния. Точка – экспериментальное значение длины пробега для гетероструктур GaAs [124].

рассеянии фононов теплопроводность и средняя длина пробега в направлении [100] оказываются в 2.2 раза меньше экспериментального значения (см. рисунок 3.14а штриховую кривую 5).

Для гетероструктуры GaAs с ориентацией плоскости {110} анизотропия теплопроводности значительно возрастает - она увеличивается в 5 раз. Максимум

теплопроводности достигается в направлении [100] и оказывается на 35 % больше минимального значения в направлении [110]. Анизотропия теплопроводности в этом случае также обусловлена медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении [100] и дефокусируется в направлении [110] (см. рисунок 3.156, кривая 2). Отношение длин пробега для медленной поперечной моды в симметричных направлениях составляет $\Lambda_{[100]}^{\{110\}t^2}$: $\Lambda_{[110]}^{\{110\}t^2}$: $\Lambda_{[110]}^{\{110\}t^2}$ = 1.9:1.26:1. Вклад этой моды в теплопроводность гетероструктуры GaAs с ориентацией {110} доминирует. Он составляет 66, 55 и 45% для направлений [100], [110] и [111], соответственно. Анизотропия длин пробега для быстрой поперечной моды мала: $\Lambda_{[100]}^{\{110\}\prime 1}$: $\Lambda_{[110]}^{\{110\}\prime 1}$: $\Lambda_{[111]}^{\{110\}\prime 1}$ = 1.15:1.1:1. Анизотропия длин пробега для продольных фононов значительно больше: $\Lambda_{[110]}^{\{110\}L}$: $\Lambda_{[110]}^{\{110\}L}$ = 1.71 : 1.54 : 1 (см. рисунок 3.156, кривая 3). Однако их вклад в теплопроводность мал: он достигает 21% для направления [111] и уменьшается для направления дефокусировки [100] до 7%. Благодаря частичной компенсации вкладов анизотропия теплопроводности гетероструктуры GaAs с ориентацией {110} уменьшается до 35% (см. рисунок 3.156, кривая 5). Отношение средних длин пробега для неё составляет: $\Lambda_{[100]}^{\{110\}}: \Lambda_{[111]}^{\{110\}}: \Lambda_{[110]}^{\{110\}} = 1.35:1.08:1$. Следует отметить, что при измерении теплопроводности гетероструктур с ориентациями плоскостей {100} и {110}, имеющих одинаковые параметры зеркальности, для направлений теплового потока [100] и [110] мы получим: $\kappa_{[100]}^{\{110\}}$: $\kappa_{[100]}^{\{110\}} = 1.2$ и $\kappa_{[110]}^{\{110\}}$: $\kappa_{[110]}^{\{110\}} = 1.5$. Таким образом, для направления теплового потока [110] зависимость теплопроводности от ориентации гетероструктур оказывается заметно больше. Итак, в теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs доминируют квазипоперечные фононы они обеспечивают от 80 до 93% теплопереноса.

3.5 Выводы

Основные результаты третьей главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Предложен метод оценки влияния фокусировки квазипоперечных мод на плотность фононных состояний (ПФС). Он позволил определить средние значения ПФС для областей фокусировки и дефокусировки медленных и быстрых квазипоперечных мод. Построены угловые распределения ПФС квазипоперечных мод для волновых векторов в плоскости грани куба и диагональной плоскости. Проанализирована анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов для всех акустических мод в спинтронных наноструктурах. Показано, что для всех нанопроводов угловые зависимости длин пробега быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях {100} и {110} коррелируют с угловыми зависимостями ПФС для этих мод. Максимальные значения длины пробега этих мод достигаются в областях фокусировки,

определенных нами из анализа ПФС. Максимумы теплопроводности во всех материалах обеспечиваются медленной квазипоперечной модой и достигаются в направлениях типа [100] или близких к ним. Нами показано, что нет корреляции между параметрами упругой анизотропии *k*-1 и анизотропией решеточной теплопроводности.

2. Для исследованных кристаллов максимум параметра упругой анизотропии *k*-1 имеет место для кристаллов Fe, а минимум - для MgO, однако максимальная анизотропия теплопроводности имеет место для кристаллов MgO. Определены направления потоков тепла, обеспечивающие максимальную и минимальную фононную теплопроводность в нанопроводах.

3. В квадратных пленках с ориентациями плоскостей {100} и {111} для произвольного направления потока тепла область усреднения длин пробега по углам в плоскости пленок захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому теплопроводность (средняя длина свободного пробега), а также длины пробега фононов различных поляризаций становятся изотропными. В квадратных пленках с ориентацией {110} угол между направлениями фокусировки и дефокусировки увеличивается в два раза по сравнению с ориентацией {100}, и для произвольного направления потока тепла при усреднении длин пробега по углам в плоскости пленок оба направления не могут быть одновременно охвачены. Поэтому теплопроводность в плоскости пленки {110} становится анизотропной, как и вклады акустических мод.

4. С увеличением длины пленок интервалы углов, определяющие основной вклад при усреднении длин свободного пробега в плоскости пленок, значительно сужаются. В предельном случае *L>>W* усреднение по углам в плоскостях пленок оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов. Поэтому длины пробега в пленках с ориентациями {100} и {111} становятся анизотропными.

5. Анализ влияния фокусировки на распространение фононных мод в пленках с ориентациями {100} и {111} показал, что для квадратных пленок с плоскостью {100} для быстрых и медленных поперечных фононов преобладает эффект фокусировки. В то же время для пленок с плоскостью {111} для медленной поперечной моды преобладает эффект дефокусировки, и длина свободного пробега моды становится меньше, чем в модели изотропной среды. Поэтому средняя длина свободного пробега, как и полная теплопроводность для рассмотренных материалов, уменьшается в 2-2.4 раза при переходе от пленок с плоскостью {100} к ориентациям {111}.

6. Исследовано влияние фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs при низких температурах. Определены параметры зеркальности отражения фононов от границ гетероструктур, характеризующие тепловой поток в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Рассчитаны угловые зависимости длин свободного пробега квазипродольных и квазипоперечных фононов, а также средних длин пробега, определяющих теплопроводность гетероструктур с ориентациями плоскостей {100} и {110}. Показано, что теплопроводность гетероструктур с ориентацией плоскостей {100} имеет малую анизотропию и значительно большие значения, чем для гетероструктур с ориентацией {110}. Изучена роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в теплопроводности гетероструктур. Показано, что доминирующий вклад вносят квазипоперечные фононы, которые обеспечивают от 80 до 93% теплопереноса в гетероструктурах.

Основные результаты, приведенные в Главе 3, опубликованы в работах [A3, A4, A5, A6, A7, A9].

4 Фокусировка фононов и электронный транспорт в монокристаллах калия

В работах [46-52] нами исследовано влияние анизотропии упругой энергии на термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия. Рассчитаны спектр и векторы поляризации фононов и рассмотрено влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию в этих кристаллах. Ранее при исследовании электрон-фононной релаксации в металлах и полупроводниках (см. [16, 19-23, 125-136] и ссылки в них) для фононов использовали модель изотропной среды. В этой модели только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами, давать вклад в электросопротивление и термоэдс увлечения [16, 19-23, 108, 125-143]. В теории явлений электронного переноса обычно предполагается [20-23, 71, 125, 126], что электрическое поле, приложенное к проводнику, вызывает возмущение только распределение носителей тока, а фононная система остается в равновесии. Однако электрон-фононное взаимодействие в твердых телах приводит к обмену неравновесным импульсом между подсистемами электронов и фононов, и функция распределения фононов становится неравновесной – возникает дрейф фононов в направлении упорядоченного движения электронов [49]. При высоких температурах (порядка температуры Дебая) доминирующим механизмом релаксации импульса фононов является фонон-фононные процессы переброса, которые приводят фононную систему к равновесному состоянию. В этом случае обратным влиянием неравновесности фононов на электроны можно пренебречь [16, 19-23, 71]. При низких температурах доминируют нормальные процессы фонон-фононного рассеяния. Поэтому взаимодействия фононов с фононами недостаточно для восстановления равновесного распределения, и значения проводимости и других кинетических коэффициентов могут значительно отличаться от рассчитанных в предположении равновесности фононной системы [16, 19-23, 71, 125-135].

Хорошо известно, что градиент температуры, приложенный к проводнику, вызывает отклонение от равновесия и электронной, и фононной подсистем [16, 19-23, 71]. В этом случае электрон-фононное взаимодействие приводит к взаимному влиянию неравновесности электронов и фононов, т.е. к эффектам взаимного увлечения. Сильное увлечение электронов фононами имеет место тогда, когда скорость релаксации фононов на электронах превосходит скорости релаксации на фононах в процессах переброса, на дефектах и на границах образца. Сильное увлечение имеет место в случае, когда как для фононов, так и для электронов электрон-фононный механизм релаксации импульса является преобладающим. Исследованию эффектов электрон-фононного увлечения посвящено большое число работ (см. [16, 19-23, 108, 125-144]). Точное решение системы кинетических уравнений для электрон-фононных систем с учетом взаимного влияния неравновесности электронов и фононов даже при упрощающих

предположениях о сферичности изоэнергетических поверхностей для электронов и модели изотропной среды для фононов до сих пор не найдено. Приближенные решения для невырожденных полупроводников были найдены в работах [128-130] с помощью разложения возмущенных функций распределения в ряд по степеням малого параметра, определяемого влиянием неравновесности электронов на фононную функцию распределения. Для металлов такие исследования были проведены в работах [131-136]. Авторы [131] рассмотрели лишь электропроводность металлов в условиях сильного взаимного увлечения электронов и фононов. Впервые влияние неравновесности фононной системы на термоэдс увлечения в металлах было рассмотрено Л.Э. Гуревичем в работах [137, 138].

Эффект электрон-фононного увлечения в германии впервые был экспериментально обнаружен Джеболлом и Халлом [139]. Фредерикс и Херринг в работах [108, 140, 141] развили теорию термоэлектрических явлений в полупроводниках для объяснения экспериментальных данных [139]. В работах [142, 143] Зонгеймер с соавторами показал, что при рассмотрении влияния эффектов увлечения на термоэлектрические явления необходимо совместно решать систему кинетических уравнений для носителей тока и фононов при учете отклонений обеих функций распределения от равновесных. В этих работах показано, что результаты, полученные в работах [108, 140], являются некорректными, поскольку соотношения симметрии Онзагера для термоэлектрических коэффициентов в них не выполняются. В работах [135, 136] система кинетических уравнений была решена для вырожденных проводников в классических магнитных полях в нулевом приближении по параметру вырождения электронного газа k_BT/ζ <<1 (ζ энергия Ферми). Однако в этом приближении диффузионные потоки, как и эффекты Нернста-Эттингсгаузена, обращаются в нуль, поэтому развитая в [135, 136] теория не могла быть использована для анализа термомагнитных и термоэлектрических эффектов. Для анализа этих эффектов необходимо решить систему кинетических уравнений для неравновесных электронфононных систем, учитывая следующие члены разложения по параметру вырождения k_BT/ζ .

Такая задача была решена в работах [144-154] в первом порядке по параметру вырождения. Был разработан метод решения системы кинетических уравнений для электронной и фононной функций распределения с учетом взаимного увлечения электронов и фононов. Показано, что система кинетических уравнений для неравновесной электронной и фононной функций распределения сводится к неоднородному интегральному уравнению Вольтерра для функций распределения электронов. Найдено решение интегрального уравнения в линейном приближении по параметру вырождения. Вычислены кинетические коэффициенты и проанализировано влияние взаимного увлечения электронов и фононов на электропроводность, теплопроводность, термоэлектрические и термогальваномагнитные эффекты в проводниках с вырожденной статистикой носителей тока. В отличие от ранее выполненных работ, в расчете не

использовали разложение по малому параметру, обусловленному малостью электрон-фононного взаимодействия по сравнению с электрон-примесным либо слабостью взаимного влияния неравновесности электронной и фононной подсистем. Проанализирована зависимость перенормировки термоэлектрических потоков и потоков тепла за счёт взаимного увлечения электронов и фононов. Анализ потока тепла, переносимого фононами, но обусловленного неравновесностью электронов, показал, что этот поток приводит к перенормировке как электронного, так и фононного потоков тепла. Установлено, что необходимым условием выполнения соотношений микроскопической обратимости Онзагера является учет вклада этого потока в полный электронный поток тепла. Недостатками этого подхода является, во-первых, учет только первого порядка по параметру вырождения, что не позволяет корректно учесть неупругость электрон-фононной релаксации, и во-вторых, использование модели изотропной среды для фононов. Последнее предполагает, что при расчете кинетических эффектов в [144-154] в электрон-фононной релаксации учитывается только деформационное взаимодействие с продольными фононами. Следует отметить, что эффекты взаимного увлечения электронов и фононов не оказывают существенного влияния на термоэдс электрон-фононного увлечения. Дело в том, что термоэдс находится из условия равенства нулю полного тока через образец [21-23, 71, 125-127]. Поэтому средняя скорость упорядоченного движения электронов в любом физически малом объёме образца равна нулю. В связи с этим обратная передача импульса от электронов к фононам мала, и влиянием неравновесности электронов на электроны через подсистему фононов можно пренебречь.

В работах [155-159] были измерены термоэлектрические эффекты в щелочных металлах при низких температурах и проанализировано влияние электрон-фононного увлечения на термоэдс. Полученные результаты, как и термоэдс увлечения в других металлах, интерпретировали в модели изотропной среды [155-159]. В этой модели предполагается: (1) спектр фононов изотропный, направление групповой скорости и волнового вектора фононов совпадают, эффект фокусировки отсутствует; (2) все колебательные моды являются чистыми модами: чисто продольными или чисто поперечными. В этой модели только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами и участвовать в электрон-фононной релаксации [16, 19-23, 125-159]. Влияние анизотропии упругой энергии кристалла на спектр, векторы поляризации фононов и электрон-фононную релаксацию не рассматривали.

Эти эффекты были впервые учтены в работе [57] при расчете термоэдс увлечения в бесщелевом полупроводнике HgSe:Fe. Показано, что при достаточно низких температурах фокусировка фононов приводит к анизотропии термоэдс увлечения. Однако бесщелевые полупроводники HgSe:Fe являются не очень удобным объектом для исследования влияния упругой анизотропии на термоэдс увлечения, так как концентрация примесей железа в них

достаточно велика ($N_{\rm Fe} \approx 1.10^{19}$ см⁻³), и рассеяние фононов на дефектах и примесях доминирует вплоть до температуры 0.4 К. Поэтому имеются определенные трудности для реализации режима кнудсеновского течения фононного газа и наблюдения анизотропии термоэдс увлечения, обусловленной фокусировкой фононов, из-за рассеяния фононов на примесях железа в [57]. Более удобной системой для анализа влияния фокусировки фононов на термоэлектрические эффекты являются щелочные металлы Li, Na, K. Они обладают кубической симметрией, упругая энергия определяется тремя модулями упругости, а спектр электронов проводимости близок к изотропному. Однако кристаллы Li и Na при температурах ниже 36 К испытывают мартенситный переход ОЦК – ГПУ и при более низких температурах представляют двухфазную систему. В связи с этим основное внимание уделено исследованию влияния фокусировка фононов на электронный и фононный транспорт в кристаллах калия. Они имеют аномально большой по сравнению с полупроводниковыми кристаллами параметр анизотропии упругой энергии. Поэтому отклонения направлений групповых и фазовых скоростей фононов в кристаллах калия, приводящее к ИХ фокусировке, значительно сильнее сказывается на решеточной теплопроводности [46] и термоэдс увлечения [47-50], чем в полупроводниковых кристаллах.

Анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах показал, что поперечная компонента квазипродольных колебаний в кубических кристаллах мала, и ей можно пренебречь [35, 57]. Вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым: его максимальное значение для медленной поперечной моды составляет 14 и 16.5% для кристаллов Si и Ge [38] и достигает, согласно нашим оценкам, 30, 70 и 60%, для кристаллов K, Na и Li, соответственно [160]. Второй эффект обусловлен влиянием анизотропии упругой энергии на векторы поляризации фононов. Поскольку в упруго анизотропных кристаллах распространяются квазипродольные и квазипоперечные фононы, которые имеют отличную от нуля продольную компоненту [35, 57], то в рамках стандартной теории потенциала деформации все колебательные моды могут взаимодействовать с электронами [16, 19-21] и давать вклад в электрон-фононное увлечение. Таким образом, кристаллы калия являются удобной модельной системой для исследования эффектов, обусловленных влиянием анизотропии упругой энергии на явления электронного переноса.

Основное внимание в этой главе уделено анализу влияния анизотропии упругой энергии на электронный и фононный транспорт в объёмных кристаллах калия при низких температурах. В работах [46-48] определен спектр, векторы поляризации фононов, а также проанализированы термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность в кристаллах калия. В этих работах предполагается, что квазипопоперечные фононы в кристаллах калия могут взаимодействовать с электронами только благодаря их продольной компоненте, а константа деформационного потенциала $E_{0\lambda}$ одинакова для продольных компонент всех колебательных мод. Согласно [21-23, 71, 125], $E_{0\lambda}=(n/N(\varepsilon_F))=(2/3)\varepsilon_F=1.41$ эВ, n – концентрация электронов, $N(\varepsilon_F)$ – плотность состояний на уровне Ферми ε_F . Было показано, что при низких температурах вклад медленных квазипоперечных мод в термоэдс увлечения в кристаллах калия, который ранее не учитывали (см. [16, 19-23, 71, 108, 125-155]), на порядок величины превышает вклад продольных фононов. Более того, в кристаллах калия в отсутствие дислокаций суммарный вклад квазипоперечных мод, который ранее не учитывали, достигал 96%, тогда как на *L*-фононы остается всего 4% (см. [48]). Очевидно, что модель изотропной среды, положенная в основу интерпретации термоэлектрических явлений [16, 19-23, 71, 108, 125-159], является некорректной для описания электрон-фононной релаксации в металлах. Поэтому анализ роли квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения требует более тщательного изучения.

Дальнейший анализ в нашей работе [49] показал, что приближение, принятое в работах [46-48], является недостаточным для объяснения экспериментальных данных. Расчет термоэдс увлечения объёмных кристаллов калия в этой работе в интервале Т=(1-3) К дал значения, почти в два раза меньшие данных [158]. В ней показано, что добиться согласования с результатами [158] можно, если константа деформационного взаимодействия продольной компоненты квазипоперечных фононов с электронами будет в два раза больше, чем для *L*-фононов. Однако это предположение противоречит теории деформационного потенциала [21-23, 71], поскольку продольные компоненты как продольных, так и квазипоперечных фононов должны описываться одной и той же константой связи с электронами, поскольку обусловлены деформациями сжатия и растяжения. Поэтому в [50] учтено влияние сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и впервые проанализирована их роль в термоэдс увлечения в металлах при низких температурах. Из сопоставления результатов расчета термоэдс и решеточной теплопроводности в объёмных кристаллах калия с экспериментальными данными [158] определена константа электронфононного взаимодействия для сдвиговых компонент колебательных мод в кристаллах калия. Полученное значение E_{0t} =0.11 эВ оказалось на порядок величины меньше, чем следует из теории деформационного потенциала для продольных компонент. Ранее Займан в монографии [21] показал, что сфера Ферми в щелочных металлах подходит достаточно близко к границе зоны Бриллюэна и должна деформироваться в соответствии с симметрией решетки. Согласно оценкам [21, 161], для кристаллов калия отклонение изоэнергетической поверхности от сферы Ферми К- K_{F} /К составляет 7%. Спектр электронов проводимости с энергией Ферми становится анизотропным, и они получают возможность взаимодействовать со сдвиговыми деформациями, т.е. с поперечной компонентой колебательных мод (см., например, [162, 163]). Таким образом, анализ результатов экспериментальных исследований [158] свидетельствует, что квазипоперечные фононы могут участвовать в электрон-фононном увлечении за счет поперечной

компоненты. Однако отклонение поверхности Ферми от сферической в кристаллах калия мало. Поэтому полученное в [50] соотношение констант E_{0L} и E_{0t} не является удивительным. Оно существенно отличается от полупроводниковых кристаллов, где благодаря значительно большей анизотропии спектра носителей тока константа E_{0t} на два порядка больше, и, как правило, превышает значение E_{0L} для продольных фононов [162, 163].

В нашей работе [52] проанализировано влияние фокусировки фононов на взаимное увлечение электронов и фононов. Рассчитана роль этого эффекта в электросопротивлении калия при низких температурах. гидродинамическом кристаллов В приближении проанализирован обмен импульсом между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям колебательного спектра. Учтены актуальные механизмы релаксации импульса фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. Показано, что в предельном случае сильного взаимного увлечения, когда доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации, как для электронов, так и для фононов, электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха-Грюнайзена. При этом скорости дрейфа фононов всех поляризаций и электронов близки и определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния. В противоположном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния, и фононная система остается в равновесии, температурные зависимости электросопротивления следуют теории Блоха-Грюнайзена. В этом случае скорости дрейфа фононов для всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов [52].

Итак, одной из актуальных проблем, возникшей при изучении электронного транспорта в упруго анизотропных металлах, является изучение влияния фокусировки фононов и сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и кинетические эффекты. В работах [50-52] получен ряд качественно новых результатов для термоэдс увлечения и электросопротивления кристаллов калия. Показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, вклад медленных квазипоперечных мод, который ранее не учитывали в теории Блоха–Грюнайзена и термоэдс увлечения, на порядок величины превышает вклад *L*-фононов [50-51]. При этом сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия при низких температурах. Для образцов с различной концентрацией дислокаций он в 4-6 раз превышает вклад *L*-фононов.

4.1 Электрон-фононная релаксация в упруго анизотропных металлах

Для каждого направления волнового вектора в кубических кристаллах существуют три

независимые волны со своими фазовыми скоростями $S_0^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и взаимно перпендикулярными смещениями [38, 24]. В общем случае ни одно из этих смещений не совпадает ни с нормалью к фронту волны, ни с перпендикулярным направлением к нормали: т.е. волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными [24, 35]. Продольная компонента колебательных мод определяется скалярным произведением (e^{λ} ·**n**). Поэтому квазипоперечные фононы могут вносить вклад в термоэдс увлечения за счет продольной компоненты [47-48]. В рамках стандартной теории деформационного потенциала для Фурье компоненты матричного элемента электрон-фононного взаимодействия имеем [21, 23, 47, 48]:

$$\left(C_0^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^2 = \left(E_{0L}^2\left(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right)^2\right) \hbar / S^{\lambda}(\theta,\varphi)\rho.$$
(4.1)

В металлах механизм взаимодействия электронов проводимости со сдвиговыми волнами относится к слабо разработанным проблемам. Поэтому мы воспользуемся феноменологическим подходом, основанным на представлениях, развитых в [25]. Было показано, что поле смещений в изотропной среде $\mathbf{u}=A\mathbf{e}^{\lambda}(\mathbf{q})\exp(i(\omega t-\mathbf{qr}))$ можно представить в виде суммы двух слагаемых, определяемых продольными и поперечными компонентами смещений (см. подробнее [24], раздел 3):

$$\mathbf{u} = \operatorname{\mathbf{grad}} \psi + \operatorname{\mathbf{rot}} \mathbf{A} \Longrightarrow \mathbf{n} \left(\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right) + \left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right]. \tag{4.2}$$

Здесь первое слагаемое характеризует потенциальное поле – поле смещений для продольных волн, оно обусловлено деформациями сжатия и растяжения. Второе слагаемое – вихревое поле для поперечных волн, обусловлено сдвиговыми деформациями, для которых *divA*=0. В упруго анизотропных кристаллах у всех колебательных мод имеются и продольные, и поперечные компоненты. Поэтому мы предполагаем, что в упруго анизотропных кристаллах продольные компоненты колебательных мод, обусловленные деформациями сжатия и растяжения, могут быть описаны в рамках потенциала деформации, а поперечные компоненты смещений – вихревым полем. Разложим вектор поляризации $e^{\lambda}(\mathbf{q})$ на две компоненты: продольную $e^{\lambda}_{\Pi} = \mathbf{n}(e^{\lambda}\mathbf{n})$ и поперечную $e^{\lambda}_{\perp} = [e^{\lambda}\mathbf{n}]$ (обусловленную сдвиговыми деформациями решётки):

$$\mathbf{e}^{\lambda} = \mathbf{e}^{\lambda}_{\uparrow\uparrow} + \mathbf{e}^{\lambda}_{\bot} = \mathbf{n} \left(\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right) + \left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right]$$
(4.3)

Согласно [50], Фурье-образ матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в упруго анизотропных металлах при выделении продольных и поперечных компонент векторов поляризации колебательных мод можно представить в виде:

$$\left(C_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2} = \left(E_{eff}^{\lambda}\right)^{2} \hbar \left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\rho\right), \qquad \left(E_{eff}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2} = \left(E_{0L}^{2}\left(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right)^{2} + E_{0t}^{2}\left(\left[\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right]^{2}\right)\right). \tag{4.4}$$

Здесь мы учли, что средние значения смешанных произведений продольных и поперечных компонент малы по сравнению с их квадратами (таблица 4.1). Следует отметить, что продольные компоненты колебательных мод описываются потенциальным полем и могут быть учтены в

	$\langle (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})^{2} \rangle$	$\langle \left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right]^{2} \rangle$	$\left\langle \left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right] (\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n}) \right\rangle$	$\left\langle v_{_{pe_L}}^{*\lambda}(heta, arphi) ight angle$	$\left\langle v_{_{pe_T}}^{*\lambda}(heta, arphi) ight angle$	$\left\langle {{v}_{_{pe}}^{*\lambda}(heta ,arphi)} ight angle$
L	0.97	0.035	2.86.10-6	$9.97 \cdot 10^4$		$9.97 \cdot 10^4$
t_1	0.0028	0.997	6.91·10 ⁻⁹	287	627	914
<i>t</i> ₂	0.032	0.97	1.18.10-8	1.18.10-8	608	$3.94 \cdot 10^3$

рамках стандартной теории потенциала деформации [19-23], тогда как поперечные (сдвиговые)

Таблица 4.1 – Средние значения продольных и поперечных компонент колебательных мод, а также безразмерных скоростей релаксации на электронах.

компоненты колебательных мод описываются вихревым полем. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют. Вследствие этого они входят в матричный элемент (4.4) аддитивным образом [50]. В нашей теории это проявляется в том, что средние значения для смешанных произведений на 6-8 порядков меньше средних значений $\langle (\mathbf{e}^{\lambda} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$ и $\langle [\mathbf{e}^{\lambda} \cdot \mathbf{n}]^2 \rangle$, и ими можно пренебречь (см. таблицу 4.1). Константа $E_{0\lambda} = (n/N(\varepsilon_F)) \approx 1.41$ эВ характеризует взаимодействие электронов с продольными компонентами, а константа E_{0t} определяет взаимодействие электронов с поперечными компонентами колебательных мод. Из сопоставления результатов расчета термоэдс увлечения с данными эксперимента [158] E_{0t} определена в работе [50] и оказалась на порядок величины меньше, чем E_{0L} . Это неудивительно, так как согласно оценкам [162] отклонение поверхности Ферми от сферической в кристаллах калия мало: оно составляет 7%. Усреднение по векторам поляризации в эффективных константах взаимодействия $E_{eff}^{\lambda} = \left\langle \left(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^{2} \right\rangle \right\}^{1/2} = \left\{ \left(E_{0L}^{2} \left\langle \left(\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right)^{2} \right\rangle + E_{0t}^{2} \left\langle \left(\left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right]^{2} \right) \right\rangle \right) \right\}^{1/2} \text{ дает оценки вкладов в релаксацию импульса фононов на }$ электронах для продольных и поперечных компонент всех колебательных мод в кристаллах калия. Для продольных фононов для среднего значения получим $E_{eff}^L \approx 1.39$ эВ, которое близко к величине Еод. Для них продольная компонента обеспечивает подавляющий вклад в релаксацию импульса, тогда как на поперечную компоненту остается 0.02%. Для медленной t₂-моды находим $E_{e\!f\!f}^{\prime 2} pprox 0.28$ эВ. Отметим, что квадрат эффективной константы связи электронов с продольными фононами с $(E_{eff}^L)^2$ в 25 раз больше, чем с медленной t_2 -модой. Для t_2 -моды продольная компонента обеспечивает 85% релаксации электронов (и, соответственно, константы $\left(E_{eff}^{\prime\,2}\right)^2$), тогда как на поперечную компоненту остается всего 15%. Для быстрой поперечной моды $E_{eff}^{t1} \approx 0.13$ эВ, что только на 20% превышает значение E_{0t} . Для быстрой t_1 -моды вклад сдвиговой компоненты в $\left(E_{eff}^{\prime 1}\right)^2$ увеличивается до 68.5% и вдвое превышает вклад продольной компоненты. Отметим, что в отличие от модели изотропной среды, эффективная константа $\left(E_{eff}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2}$ является функцией углов θ и ϕ , определяющих направление волнового вектора относительно



Рисунок 4.1 – Зависимости квадрата эффективной константы электрон-фононной связи $(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi))^2$ в кристаллах калия для волновых векторов в плоскости грани куба (а) и (в), в диагональной плоскости (б): кривая 1 - для продольных фононов, кривая 2 - для медленной t_2 -моды, кривая 3 - для быстрой квазипоперечной моды.

кристаллографических осей (рисунок 4.1). Эти зависимости определяются квадратами продольных и поперечных компонент векторов поляризаций. Как видно из рисунка, они имеют довольно любопытный вид: для продольных фононов отклонения от изотропного распределения малы, не превышают 10%. Однако для медленной t_2 -моды величина $(E_{eff}^{t2}(\theta, \varphi))^2$ меняется достаточно резко для обоих сечений (см. рисунок 4.1). Для волновых векторов в плоскости грани куба максимальные значения достигаются в направлениях типа $\theta = \pi/6 \pm \pi \cdot n/2$, а минимальные – в направлениях типа $\theta = \pi/4 \pm \pi \cdot n/2$, при этом отношение максимальных значений к минимальным

составляет 13.6. Для волновых векторов в диагональной плоскости максимальные значения $(E_{eff}^{r_2}(\theta, \varphi))^2$ достигаются в направления типа $\theta = \pm 0.274 + \pi \cdot n$, а минимальные – в направлениях типа $\theta = \pi/4 \pm \pi \cdot n/2$, при этом отношение максимальных значений к минимальным возрастает до 15.

4.2 Влияние фокусировки фононов на решеточную теплопроводность и термоэдс увлечения в кристаллах калия

При анализе термоэдс увлечения в проводниках с вырожденной статистикой носителей тока для фононов ранее использовали модель изотропной среды [21, 22, 71, 125-126, 137-141, 153]. Использование модели анизотропного континуума для фононов в нашей работе [57] позволило учесть влияние анизотропии упругой энергии кристалла на фокусировку и векторы поляризации фононов при расчете термоэдс увлечения вырожденных полупроводниках. Эта модель использована в наших работах [47-50] при анализе термоэдс увлечения в кристаллах калия. Вычислим поток заряда, обусловленный действием электрического поля и градиента температуры в металле с изотропным законом дисперсии носителей тока. Исходим из системы кинетических уравнений для неравновесных электронной $f(\mathbf{k},\mathbf{r})$ и фононной N_q^{λ} функций распределения [48, 135-136, 153, 154]:

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_k \nabla_r) f_{\mathbf{k}} = I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_q^{\lambda}),$$
(4.5a)

$$\mathbf{v}_{q}^{\lambda}\nabla_{r}N_{q}^{\lambda} = -(N_{q}^{\lambda} - N_{q\lambda}^{(0)})\nu_{ph}^{(1)\lambda} + I_{phe}(N_{q}^{\lambda}, f_{\mathbf{k}}).$$
(4.56)

Здесь $\mathbf{v}_{k} = \partial \varepsilon_{k} / \hbar \partial \mathbf{k}, \mathbf{v}_{q}^{\lambda} = \partial \omega_{q}^{\lambda} / \partial \mathbf{q}$ – групповые скорости электронов и фононов с поляризацией λ , а скорость релаксации фононов $v_{ph}^{(1)\lambda}(q,\theta,\varphi) = v_{phB}^{\lambda}(\theta,\varphi) + \frac{k_{B}T}{\hbar} Z_{q}^{\lambda} v_{phd}^{*\lambda}(\theta,\varphi)) + v_{phl}^{\lambda}(q,\theta,\varphi) + v_{phU}^{\lambda}(q)$ включает все неэлектронные резистивные механизмы релаксации, обусловленные рассеянием фононов на границах образца $v_{phB}^{\lambda}(\Theta,\varphi)$, дислокациях V_{phd}^{λ} , дефектах (изотопическом беспорядке) v_{phl}^{λ} и в процессах фонон-фононного переброса $v_{phU}^{\lambda}(q)$. Интегралы столкновений электронов с примесями I_{eh} фононами I_{eph} и фононов с электронами I_{phe} определены в [57, 135, 136, 145, 154]: $I_{eph}(f_{k}, N_{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{q,\lambda} |C_{q}^{\lambda}|^{2} \left\{ f_{k+q}(1-f_{k})(N_{q}^{\lambda}+1) - f_{k}(1-f_{k+q})N_{q}^{\lambda} \right\} \delta(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{k} - \hbar \omega_{q}^{\lambda}) - \left[f_{k}(1-f_{k-q})(N_{q}^{\lambda}+1) - f_{k-q}(1-f_{k})N_{q}^{\lambda} \right] \delta(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{k} - \hbar \omega_{q}^{\lambda}) \right\},$ (4.6)

где $|C_q^{\lambda}|^2 = (C_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^2 q \approx (E_{eff}^{\lambda})^2 \hbar / (S^{\lambda}(\theta, \varphi)\rho) q$, E_{eff}^{λ} определяется выражениями (4.4). Спектр электронов проводимости в кристаллах калия предполагается изотропным, а для фононов используется модель анизотропного континуума [47-50, 155]. Схема, описывающая релаксацию импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе, приведена на рисунке 4.2. Релаксация импульса электронов обеспечивается рассеянием на примесях и дефектах, а фононов - на изотопическом беспорядке, дефектах и границах образца. Механизмы электрон-фононной релаксации, характеризуемые частотами veph и vphe, приводят к перераспределению импульса внутри электрон-фононной системы. Следует отметить, что эти величины не определяют скорости релаксации импульса квазичастиц. Их обратные величины определяют времена жизни квазичастиц: электронов – в состоянии с волновым вектором **k** и спином σ , а фононов – в состоянии с волновым вектором **q** и поляризацией e^{λ} . Поскольку термоэдс находится из условия равенства нулю полного тока через образец [21-23, 57, 71, 125-127, 153], то средняя скорость упорядоченного движения электронов в любом физически малом объёме образца равна нулю. В связи с этим передача импульса от электронов к фононам мала, и влиянием неравновесности электронов на электроны через подсистему фононов можно пренебречь [47-50, 57, 145] (см. рисунок 4.3). В противоположность этому при наличии градиента температуры существует стационарный поток фононов от горячего конца образца к холодному, передача импульса от стационарного потока фононов электронам велика. Поэтому она определяет ток увлечения *j*_{drag} и в значительной степени величины полной термоэдс при низких температурах (см. рисунок (4.3). Непосредственное действие градиента температуры на подсистему электронов приводит к диффузии электронов от горячего конца образца к холодному и, соответственно, к диффузионному вкладу в термоэдс. В результате термоэдс может быть представлена в виде



Рисунок 4.2 Схема, иллюстрирующая перераспределение и релаксацию импульса, полученного электрон-фононной системой от градиента температуры.



Рисунок 4.3 Схема, иллюстрирующая возникновение термоэдс в металлах: *j*_{dif} – диффузионный ток, *j*_{drag} - ток электронфононного увлечения, *j*_E - ток, обусловленный термоэлектрическим полем.

аддитивной суммы диффузионного вклада и термоэдс электрон-фононного увлечения: $\alpha = \alpha_{dif} + \alpha_{drag}$ (см. подробнее [47-50, 155]). Диффузионная термоэдс определяется известным выражением [21-23, 71, 125]:

$$\alpha_{dif} = \frac{k_B}{e} \left(\frac{\pi^2 k_B T}{3 \cdot \varepsilon_F} \right) \cdot A_{dif}, \ A_{dif} = \frac{\varepsilon_F \cdot d}{d\varepsilon} \left[\ln \left(\frac{k^3(\varepsilon)\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right) \right]_{\varepsilon = \varepsilon_F}.$$
(4.7)

Здесь $\varepsilon_{\rm F}$ – энергия Ферми, α_{dif} является величиной первого порядка малости по параметру вырождения, $\tau(\varepsilon_k) = [v_{ei}(\varepsilon_k) + v_{eph}(\varepsilon_k)]^{-1}$ – полное время релаксации электронов, $v_{ei}(k)$ – скорость релаксации электронов на примесях [21-23, 71, 125], $v_{eph}(k)$ – скорость релаксации электрона на фононах в модели анизотропного континуума. Согласно [47-50, 57] она имеет вид:

$$\nu_{eph}(k) = \frac{m}{8\pi^2 \hbar^3 \langle k \rangle^3} \sum_{\pm} \int_0^{2\pi} d\varphi_q \left| C_0^{\lambda} \right|^2 (q_{T\lambda})^5 \int_0^{2k\pm q_0} dZ_q^{\lambda} (Z_q^{\lambda})^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \Phi_{\lambda}^{\pm}(\varepsilon_k, q), \qquad (4.8)$$

$$\Phi_{\lambda}^{\pm}(\varepsilon_k, q) = \mp \left[\frac{f(\varepsilon_k \pm \hbar \omega_q^{\lambda}) - f(\varepsilon_k)}{f_0(1 - f_0)} \right] \cdot \left[1 \mp \frac{q_0^{\lambda}(\theta, \varphi)}{q} \right], \quad q_T^{\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar S^{\lambda}(\theta, \varphi)}, \quad Z_q^{\lambda} = \frac{q}{q_T^{\lambda}}, \quad q_0^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{2m_e S_0^{\lambda}(\theta, \varphi)}{\hbar}.$$

Релаксация импульса фононов в неравновесной электрон-фононной системе учитывается, не ограничиваясь линейным приближением по параметру неупругости. Предполагая спектр электронов проводимости изотропным, вычислим угловые интегралы по волновым векторам электронов в (4.6) и снимем δ -функции в законах сохранения энергии для процессов поглощения (+) и испускания (–) фононов в электрон-фононных столкновениях. В отличие от ранее выполненных исследований, при анализе термоэдс увлечения в кристаллах калия учитывается влияние анизотропии упругой энергии (фокусировки фононов) на электрон-фононное увлечение и роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн. Детали соответствующих расчетов приведены в [47-50, 57], поэтому здесь мы ограничимся конечным выражением, затем конкретизируем некоторые детали для металлов. В предельном случае сильного вырождения ($\varepsilon_k = \varepsilon_r$) выделим в явном виде члены, соответствующие поглощению (+) и испусканию (–) фонона и представим функцию $\Phi_{\lambda}^{*}(\varepsilon_r,q) = 2th(Z_q^{\lambda}/2)(Z_q^{\lambda} \mp \delta)/Z_q^{\lambda}$. В результате для термоэдс увлечения кристаллов калия получим:

$$\begin{aligned} \alpha_{drag} &= \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda,\pm} \left(\frac{3}{8\pi} \right) \int d\Omega_q \left\{ \int_{0}^{Z_{2k_F+q_0}^{\lambda}} \left(Z_q^{\lambda} \right)^3 dZ_q^{\lambda} \left(\frac{V_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{V_{ph}^{\lambda}(q)} \right) \cdot \delta^{\lambda}(\theta, \varphi) \cdot th \left(Z_q^{\lambda} / 2 \right) \left(Z_q^{\lambda} - \delta^{\lambda} \right) \left(\widetilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \right) \right\} + \\ &+ \int_{0}^{Z_{2k_F-q_0}^{\lambda}} \left(Z_q^{\lambda} \right)^3 dZ_q^{\lambda} \left(\frac{V_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{V_{ph}^{\lambda}(q)} \right) \cdot \delta^{\lambda}(\theta, \varphi) th \left(Z_q^{\lambda} / 2 \right) \left(Z_q^{\lambda} + \delta^{\lambda} \right) \left(\widetilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \right) \right], \end{aligned}$$

$$(4.9)$$

$$\delta^{\lambda}(\theta, \varphi) = \left(2m_F \left(S^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^2 \right) / \left(k_B T \right) = T_{\delta}^{\lambda}(\theta, \varphi) / T.$$

Здесь $\tilde{V}_{g^3}^{\lambda}$ и n_{q^3} – проекции групповой скорости и единичного волнового вектора фонона на направление градиента температур. В выражении для термоэдс выделим скорость релаксации электрона с импульсом k_F на тепловом фононе с импульсом q_T^{λ} :

$$\nu_{eph0}^{\lambda}(k_{F},q_{T}^{\lambda}) = \frac{m(\varepsilon_{F})(C_{0}^{\lambda})^{2}}{2\pi\hbar^{3}k_{F}^{3}} (q_{T}^{\lambda})^{5} N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0}+1).$$
(4.10)

В работах [157, 158] исследования термоэдс и теплопроводности проводили на кристаллах калия с концентрацией электронов $n_e=1.4\cdot10^{22}$ см⁻³, $k_F=0.75\cdot10^8$ см⁻¹, эффективной массой $m_F=1.1m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) и энергией Ферми $\varepsilon_F=2.12$ эВ, $\rho=0.91\cdot10^8$ г·см⁻³, $E_{0\lambda}=(2/3)\varepsilon_F=1.31$ эВ. Можно показать, что для фазовых скоростей ($S_L^{[100]}=2.24\cdot10^5$ см/сек и $S_L^{[100]}=1.7\cdot10^5$ см/сек) величины q_T^{λ} на три порядка меньше, чем $2k_F$. Поэтому в верхнем пределе интегрирования мы можем пренебречь добавкой $\pm q_0^{\lambda}$ и объединить члены, соответствующие испусканию и поглощению фононов. Тогда получим:

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{3}{4\pi}\right) \int d\Omega_q \int_{0}^{T_F^{\lambda}(\theta,\phi)/T} dZ_q^{\lambda} \left(Z_q^{\lambda}\right)^4 th \left(Z_q^{\lambda}/2 \left(\frac{v_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{v_{ph}^{\lambda}(q)}\right) \left(\frac{T_{\delta}}{T}\right) \left(\widetilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3}\right), \quad T_{\delta}^{\lambda} = \left(2m_F \left(S^{\lambda}(\theta,\phi)\right)^2\right) k_B. \tag{4.11}$$

В выражении (4.11) верхний предел интегрирования определяется отношением: $T_F^{\lambda}(\theta, \phi)/T = 2\hbar k_F S^{\lambda}(\theta, \phi)/k_B T$. Поскольку величины $T_F^{\lambda}(\theta, \phi) = 2\hbar k_F S^{\lambda}(\theta, \phi)/k_B$ имеют порядок 10^2 К ($T_F^{100]L} = 258$ К и $T_F^{100]r^2} = 196$ К), то при температурах порядка 1 К мы можем распространить верхний предел интегрирования в (4.11) до бесконечности. Для дальнейших оценок и анализа температурных зависимостей термоэдс в калии мы учтем актуальные в низкотемпературной области механизмы релаксации фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях, электронах и дефектах (изотопическом беспорядке). Для этих механизмов скорость релаксации может быть представлена в виде:

$$v_{ph}^{\lambda}(q,\theta,\varphi) = v_{phB}^{\lambda}(\theta,\varphi) + \frac{k_B T}{\hbar} Z_q^{\lambda} \Big[v_{phd}^{*\lambda}(\theta,\varphi) + v_{phe}^{*\lambda}(\theta,\varphi) \Big] + v_{phi}^{\lambda}(q,\theta,\varphi) \,. \tag{4.12}$$

Здесь $v_{phd}^{*\lambda}(\theta,\varphi) = Ab^2 N_d$ и $v_{phe}^{*\lambda}(\theta,\varphi) = m_F^2 (C_0^{\lambda}(\theta,\varphi))^2 / (2\pi \cdot \hbar^4)$ – безразмерные величины [47-48]. Согласно [50, 157, 158], $A\approx 1$, $b\approx 4.5 \cdot 10^8$ см – вектор Бюргерса, $N_d = 10^{11}$ см⁻² · \tilde{N}_d – концентрация дислокаций. Для приведенных выше параметров калия находим: $v_{phd}^{*\lambda}(\theta,\varphi) \approx 2.03 \cdot 10^{-4} \tilde{N}_d$. Здесь \tilde{N}_d является подгоночным параметром для образцов с различной степенью деформации. Как видно из (4.12), при понижении температуры роль рассеяния на дислокациях и электронах уменьшается. Скорость релаксации фононов на электронах можно представить в виде:

$$\boldsymbol{v}_{phe}^{*\lambda}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) = \frac{m_F^2 \left(\boldsymbol{E}_{eff}^{\lambda} \right)^2}{2\pi \cdot S^{\lambda}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\rho} \cdot \hbar^3}, \qquad \left(\boldsymbol{E}_{eff}^{\lambda} \right)^2 = \left(\boldsymbol{E}_{0L}^2 \left(\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right)^2 + \boldsymbol{E}_{0t}^2 \left(\left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n} \right]^2 \right) \right)$$
(4.13)

Здесь уместно отметить, что поскольку $v_{phe}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \omega_q^{\lambda} v_{phe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)$, то отношение обратных времен жизни фононов различных поляризаций будет пропорционально отношению квадратов эффективных констант связи. Поэтому рассеяние продольных фононов на электронах обеспечит в 25 раз более короткое время, чем для медленной *t*₂-моды. Для релаксации фононов на изотопическом беспорядке имеем [100, 102]:

$$v_{phi}^{\lambda}(q,\theta,\varphi) \approx A_{iso} \left(T \cdot Z_q^{\lambda} \right)^4, \qquad A_{iso} = \frac{gV_0}{12\pi} \left(k_B / \hbar \right)^4 \left\langle \left(S_0^{\lambda} \right)^{-3} \right\rangle.$$
(4.14)

Здесь V_0 – объем, приходящийся на один атом, $g=1.64\cdot10^{-4}$ – фактор изотопического беспорядка. Для константы A_{iso} в калии получим: $A_{iso}=2.85\cdot10^4$ (с град)⁻¹. Согласно оценкам [46-48, 157, 158], вклад изотопического рассеяния в полное теплосопротивление объёмных кристаллов калия при T=2 К составляет менее 1.5%, при учете дополнительного рассеяния на примесях с концентрацией 300 ррм не превышает 3% [158], рассеяния на границах – порядка 1%. Из анализа температурных зависимостей теплопроводности [158] следует, что доминирующими механизмами релаксации фононов в кристаллах калия при низких температурах (1-3) К являются рассеяние на электронах и дислокациях [46-48]. Для этих механизмов релаксации выражение для решеточной теплопроводности имеет вид:

$$\kappa(T) = \frac{J_3 k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \sum_{\lambda} \int_{-1}^{1} dx_\theta \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, \frac{\left(V_{g3}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^2}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^3 \left[v_{phd}^{*\lambda}(\theta,\varphi) + v_{phe}^{*\lambda}(\theta,\varphi)\right]},$$

$$J_3 = \frac{1}{4} \int_{0}^{Z_p^{\lambda}} dZ_q^{\lambda} \frac{\left(Z_q^{\lambda}\right)^3}{\left(sh(Z_q^{\lambda}/2)\right)^2} \approx 7.21.$$
(4.15)

Как показал анализ экспериментальных данных работы [158], для образцов с различной степенью деформации температурная зависимость теплопроводности имеет вид $\kappa(T) \sim T^{\delta}$, где показатель степени δ близок к 2. Для этих механизмов релаксации термоэдс увлечения можно представить в виде [47-50]:

$$\alpha_{drag}(T) \approx BT^{3}, \quad B = \frac{k_{B}(m_{F})^{2}J_{3ne}}{en_{e0}\pi^{3}\hbar^{4}} \sum_{\lambda} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{q} \left(\frac{k_{B}}{\hbar S^{\lambda}(\theta,\varphi)}\right)^{3} \left(\frac{\left(C_{0}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2} \times \left\{\widetilde{V}_{g3}^{\lambda}n_{q3}\right\}}{\left[v_{pd}^{*\lambda}(\theta,\varphi) + v_{pe}^{*\lambda}(\theta,\varphi)\right]}\right). \tag{4.16}$$

$$J_{3ne} = \int_{0}^{\infty} \Phi(Z_{q}^{\lambda}) dZ_{q}^{\lambda} = 24.1, \qquad \Phi(Z_{q}^{\lambda}) = (Z_{q}^{\lambda})^{3} th(Z_{q}^{\lambda}/2) / \left\{ 4 \cdot (sh(Z_{q}^{\lambda}/2))^{2} \right\}$$
(4.17)

Здесь $\Phi(Z_q^{\lambda})$ – функция распределения наиболее эффективных для термоэдс фононов. Ранее в [21-23, 71, 108, 125, 135-138] при расчете термоэдс увлечения предполагали, что интеграл

электрон-фононных столкновений может быть разложен по параметру неупругости $Z_q^{\lambda} <<1$. Однако это предположение некорректно. Дело в том, что в интеграл столкновений входят комбинации функций Ферми $f_0(a_k \pm \hbar \omega_q^{\lambda}) = (\exp(y_k \pm Z_q^{\lambda}) + 1)^{-1}$, где $y_k = (a_k - \varepsilon_F)/k_B T$, $Z_q^{\lambda} = \hbar \omega_q^{\lambda} / k_B T$. При этом параметр неупругости Z_q^{λ} нужно сравнивать с величиной y_k . Для электронов на уровне Ферми имеем $y_k=0$, а в пределах теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \le 1$. Как следует из проведенного анализа, функция $\Phi(Z_q^{\lambda})$, определяющая распределение наиболее актуальных для термоэдс фононов, отлична от нуля в интервале $1 < Z_q^{\lambda} < 10$ и достигает максимума при $Z_q^{\lambda} = 4$. Очевидно, что неравенство $Z_q^{\lambda} <<1$ не выполняется, а степенные ряды по параметру Z_q^{λ} являются расходящимися. Более того, для актуальных фононов в области теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \le 1$ выполняется противоположное неравенство: $y_k < Z_q^{\lambda}$. Нами показано, что более корректный учет неупругости приводит к уменьшению термоэдс увлечения в 2.6 раза по сравнению с линейным приближением по этому параметру [50].

Итак, при доминирующей роли релаксации фононов на электронах и дислокациях зависимость термоэдс металлов от температуры имеет вид $\alpha_{drag}(T) \approx AT^3$. Такая асимптотика термоэдс наблюдается не только в щелочных и благородных металлах, а также в ряде других металлов [150-159]. При доминирующей роли рассеяния на электронах термоэдс увлечения в пределе $T \rightarrow 0$ убывает с увеличением концентрации электронов $\alpha_{drag} \rightarrow T^3/n_e$. В этом пределе при доминирующей роли рассеяния, она пропорциональна квадрату эффективной массы и слабо возрастает с концентрацией электронов: $\alpha_{drag} \rightarrow (m_F)^2 T^3(n_e)^{1/3}$.

4.3 Роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения и решеточной теплопроводности объёмных кристаллов калия

При согласовании результатов расчета температурных зависимостей термоэдс и решеточной теплопроводности в работе [50] с экспериментальными данными [158] использованы два подгоночных параметра: константа электрон-фононного взаимодействия для сдвиговых компонент колебательных мод в кристаллах калия E_{0t} и параметр \tilde{N}_d , который определяет рассеяние фононов на дислокациях для образцов с различной степенью деформации. Константа взаимодействия электронов со сдвиговыми волнами E_{0t} в кристаллах калия на порядок величины меньше, чем с продольными компонентами E_{0t} =1.41 эВ. Такое соотношение констант E_{0t} и E_{0t} существенно отличается от таких полупроводниковых кристаллов, как германий и кремний, где благодаря значительно большей анизотропии спектра носителей тока константа E_{0t}



Рисунок 4.4 – Температурные зависимости теплопроводности образцов калия прямоугольного сечения $D \times \mu D = 0.15 \times 0.5 \text{ см}^2$ (μ =3.3) и длиной L =3.8 см с деформациями: для K4 \approx 0.1 и \approx 0.05 (кривые 1 и 2) и K5 с \approx 0.053 и \approx 0.027, (кривые 1а и 2а). Значения \tilde{N}_d приведены в таблице 4.2. Символы – экспериментальные значения [158].

на два порядка больше и, как правило, превышает значение E_{0L} для продольных фононов [162, 163]. Расчет температурных зависимостей решеточной теплопроводности для образцов калия в интервале 1.5-3 К при использовании приведенных выше экспериментальных параметров [49], показал хорошее согласие с экспериментальными данными [158] (см. рисунок 4.4). Следует отметить любопытный результат, который дал анализ вкладов колебательных мод в решеточную теплопроводность кристаллов калия при низких температурах. Мы показали, что суммарный вклад квазипоперечных мод составляет 99%, тогда как на *L*-фононы остается всего лишь 1%. При этом быстрая и медленная квазипоперечные моды обеспечивают 50% и 49% полной теплопроводности, соответственно. Такое соотношение вкладов обусловлено более слабым рассеянием быстрых, чем медленных квазипоперечных фононов на электронах. Низкотемпературная зависимость термоэдс увлечения типа $\alpha_{drag} \approx BT^3$ для кристаллов калия согласуется с зависимостями для большого количества металлов [155-159]. Естественно, что уменьшение концентрации дислокаций приводит к увеличению коэффициента |В|. Его максимальное значение достигается при $\tilde{N}_d = 0$. Этот случай представляет особый интерес, поскольку, во-первых, он позволяет сделать оценку максимальных значений термоэдс увлечения,

в совершенных кристаллах калия без дислокаций. Коэффициент |*B_{max}*| определяется упругими модулями второго порядка, плотностью кристалла и концентрацией электронов:

$$B_{\max} = \frac{15J_{3n}}{en_{e0}(\pi)^4} \left[\frac{2(\pi)^2 (k_B)^4}{15\hbar^3} \right] \sum_{\lambda} \left\langle \left(\frac{\left\{ \widetilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \right\}}{\left(S^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^3} \right) \right\rangle \approx 8.33 \,\mathrm{HB/K^4}.$$
(4.18)

В этом случае отношение вкладов колебательных мод в термоэдс увлечения имеет вид:

$$\alpha_{drag}^{t2}:\alpha_{drag}^{t1}:\alpha_{drag}^{L}:\alpha_{drag}=0.78:0.184:0.0366:1.$$
(4.19)

Эти соотношения с точностью до 0.1% совпадают с отношениями соответствующих вкладов в теплоемкость, которая в Дебаевском приближении также следует зависимости *T*³:

$$C_{V} = \frac{2\pi^{2}k_{\mathbf{B}}^{4}}{15\hbar^{3}}T^{3}\left\{\sum_{\lambda}\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right\rangle \right\}.$$
(4.20)

Как видно из (4.20), вклады от различных мод обратно пропорциональны отношениям средних значений фазовых скоростей фононов различных поляризаций в третьей степени (4.19). Поэтому термоэдс увлечения в рассматриваемом случае может быть выражена через теплоемкость:

$$\alpha_{drag}(T) \approx B_{max}T^{3} = \frac{C_{V}}{en_{e0}}R_{drag} \qquad R_{drag} = \frac{15J_{3en}}{(\pi)^{4}}\sum_{\lambda} \left\langle \left(\frac{\left\langle \widetilde{V}_{g3}^{\lambda}n_{q3} \right\rangle}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{3}}\right) \right\rangle / \left\{\sum_{\lambda} \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3} \right\rangle \right\}, \quad R_{drag} \approx 0.31.$$
(4.21)



Рисунок 4.5 – Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей фононов в кристаллах калия для волновых векторов акустических мод, лежащих в плоскости грани куба: кривая 1 – для продольных фононов, кривые 2 и 3 – для быстрой и медленной поперечных мод.

Полученный вывод о доминирующей роли медленной *t*₂-моды в термоэдс увлечения в кристаллах калия имеет простое физическое объяснение. Поскольку величина термоэдс увлечения определяется импульсом, передаваемым от неравновесных фононов электронам, то чем больше импульс фонона при фиксированной энергии, тем больше его вклад в термоэдс увлечения. В связи с этим *t*₂-мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно,

максимальный волновой вектор при фиксированном значении параметра Z_q^{λ} , вносит, согласно функции Планка, максимальный вклад в термоэдс (см. рисунок 4.5). Так, например, в направлениях типа [110] при одной и той же энергии волновой вектор t_2 -моды в 4 и 2.5 раза больше, чем для продольных фононов и быстрой поперечной моды. Далее сравним результаты расчета термоэдс с данными [158] при использовании эмпирической формулы (см. монографию [159], формула (4.18)):

$$\alpha = AT + BT^{3} + C \exp(-\theta_{U}/T)$$
(4.22)

Здесь первое слагаемое – вклад диффузионной термоэдс, второе – вклад нормальных процессов электрон-фононного рассеяния в термоэдс увлечения, а третье слагаемое определяет вклад процессов электрон-фононного переброса. В работе [158] все коэффициенты *A*, *B*, *C* и θ^* являются подгоночными параметрами и было получено хорошее согласие температурных зависимостей полной термоэдс с данными эксперимента (см. [158], рисунок 4). Однако такая подгонка не является корректной, поскольку для трех из четырех образцов калия K4 и K5 с различной концентрацией дислокаций коэффициенты |B| значительно превосходили предельно допустимую величину $|B_{\text{max}}| = 8.33$ нВ/K⁴ (см. [158], таблицу 1). Так, например, для образцов калия K4 ε =0 $|B^{\bullet}| = 9.4$ нВ/K⁴ и K5 с ε =0.053 и ε =0 $|B^{\bullet}| = 10$ и 12.2 нВ/K⁴ (см. таблицу 4.2). Хотя очевидно, что их значения должны быть равны или меньше $|B_{\text{max}}|$. В нашей теории

Таблица 4.2 – Значения параметров \tilde{N}_d , *A*, *B*, *C* $u \theta^*$ для образцов калия K4 и K5 с различной концентрацией дислокаций, вычисленные при $E_{0L}=1.41$ эВ и $E_{0t}=0.11$ эВ, значения *A**, *B**,*C**, θ_U^* взяты из работы [158].

	\widetilde{N}	Α,	A*,	В,	B*,	С,	С*,	θ_{U} ,	$\theta^*_{\scriptscriptstyle II}$.
	IN _d	нB/К ²	нВ/К ²	нB/К ⁴	нВ/К4	нВ/К	нВ/К	К	K
K5 ε=0.053	0.17	-4	5	-6.08	-10	$5 \cdot 10^4$	$2.5 \cdot 10^4$	20	15.2
K5 ε=0.027	0.03			-7.76				20	
Κ5 ε=0	0	-9	-0.5	-8.33	-12.2	9.10^{4}	$3 \cdot 10^4$	20	15.2
Κ4 ε=0.1	0.55	1	7	-4.13	-7.3	$2.3 \cdot 10^4$	$1.9 \cdot 10^4$	20	15.9
Κ4 ε=0.05	0.14			-6.35				20	
Κ4 ε=0	0	7.8	9	-8.33	-9.4	$8 \cdot 10^4$	$2.6 \cdot 10^4$	20	15.9

коэффициенты *В* рассчитывали для всех образцов с различной концентрацией дислокаций, а для определения полной термоэдс подгоночными параметрами являются коэффициенты *A* и *C*. Они использованы для подгонки результатов на концах экспериментального интервала 1.2 < T < 3.5 К. Температура активации процессов электрон-фононного переброса θ_U определяется фононным спектром, поэтому не должна варьироваться от образца к образцу. Её общепринятое значение

для калия 20-23 К [159]. При этом оценка температуры активации процессов переброса за счет медленной поперечной моды в окрестности направлений типа [011] в работе [165] дала значение $\theta_U = 8$ К. В этом направлении для неё реализуется максимальное значение волнового вектора на изоэнергетической поверхности (см. рисунок 4.5), которое в 3 раза большее, чем её минимальная величина. Поэтому для неё мы использовали значение $\theta_U = 20$ К. Коэффициенты *B* рассчитывали по формулам (4.17) и проверяли согласно (4.12)–(4.15). Использование значений $E_{0L}=1.41$ эВ и $E_{0L}=0.11$ эВ позволило согласовать температурные зависимости термоэдс с данными [158] и удовлетворить условию $|B| < |B_{max}|$ (см. рисунок 4.6 и таблицу 4.2). С определением константы E_{0L} возникла нестандартная ситуация. Обычно при определении параметров нового механизма релаксации мы стараемся минимизировать все фоновые механизмы релаксации (рассеяние на дефектах, дислокациях и т.д.). Однако константа $(E_{eff}^2)^2$ входит и в числитель, и в знаменатель термоэдс увлечения. Поэтому для совершенных кристаллов калия (и для коэффициента B_{max}) она взаимно сокращается. В связи с этим термоэдс увлечения в них уже не зависит от констант



Рисунок 4.6 – Температурная зависимость термоэдс для K4: $\varepsilon \approx 0.1 \quad \tilde{N}_d = 0.4, \quad \varepsilon \approx 0$ (кривые 1 и 2), K5: с $\varepsilon \approx 0.053 \quad \tilde{N}_d = 0.14, \quad \varepsilon \approx 0$ (кривые 3 и 4). Символы – экспериментальные значения [158].

электрон-фононного взаимодействия (4.16). Поэтому только наличие дислокаций позволило определить константу взаимодействия электронов с поперечными компонентами колебательных мод. Как видно из таблицы 4.2, коэффициенты В существенным образом зависят от концентрации дислокаций. Так, например, для образца К4 с максимальной деформацией *ε*=0.1 коэффициент В в два раза меньше B_{max}. Это позволяет надеяться, что мы надежно определили константу взаимодействия электронов со сдвиговыми волнами. С увеличением концентрации дислокаций вклад продольных фононов в термоэдс увлечения в кристаллах калия возрастает, однако остается существенно меньше вклада квазипоперечных фононов: так, например, при температуре 2 К для образца К5 с деформацией ε =0.053 вклад α^{L}_{drag} составляет 5%, а для образца К4 с максимальной деформацией *ε*=0.1 он возрастает до 7%. Рассмотрим изменение соотношения различных вкладов в термоэдс. При температурах ниже 1 К роль диффузионного вклада возрастает, и при T=0.5 К он уже в 3 раза больше фононного, а процессы электрон-фононного переброса выморожены. В интервале температур 1.5<T<2.5 К процессы переброса также выморожены, а в термоэдс преобладает вклад нормальных процессов электрон-фононного рассеяния. Так, например, при T=2 К он на порядок величины превышает как диффузионный, так и вклад процессов электронфононного переброса. Поэтому в этом температурном интервале процессами переброса можно пренебречь. Как видно из температурных зависимостей полной термоэдс, в интервале 3-3.5 К, что соответствует минимуму термоэдс, вклады нормальных процессов электрон-фононного рассеяния и процессов переброса сравниваются. При дальнейшем увеличении температуры доминируют процессы электрон-фононного переброса [166]. Как видно из рисунка 4.6, в интервале 1-3 К результаты расчета полной термоэдс кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [158].

Одним из важных результатов, полученных при анализе термоэдс увлечения, является определение константы связи электронов со сдвиговыми волнами и учёт их влияния на электронфононную релаксацию в кристаллах калия. Одним из результатов, заслуживающих внимания, является определение максимальных значений термоэдс электрон-фононного увлечения при низких температурах $T << \theta_D$ в совершенных кристаллах калия при доминирующей роли нормальных процессов электрон-фононного рассеяния. Показано, что максимальные значения термоэдс увлечения не зависят от констант электрон-фононной релаксации, а полностью определяются упругими модулями второго порядка, плотностью кристалла и концентрацией электронов. Этот результат может быть использован для оценки максимальных значений термоэдс увлечения в других щелочных и благородных металлах.

4.4 Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление кристаллов калия

В этом разделе представлен анализ влияния анизотропии упругой энергии на электросопротивление кристаллов калия. Рассчитаны вклады всех колебательных мод в электрон-фононную релаксацию. Ранее интерпретация данных по электросопротивлению щелочных металлах основывалась на теории Блоха-Грюнайзена [17-23]. В ней учитывали нормальные процессы электрон-фононного рассеяния, а для фононов использовали модель изотропной среды. В этой модели предполагается [17-23], что, во-первых, в электрон-фононной релаксации принимают участие только *L*-фононы, которые полностью определяют электросопротивление металлов, а во-вторых, система фононов находится в равновесии. Весь импульс, передаваемый электронами фононам, релаксирует внутри подсистемы фононов за счет резистивных процессов рассеяния: рассеяния фононов на дефектах и в процессах фононфононного переброса. В отличие от теории Блоха-Грюнайзена в нашей работе [51] учтено влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и проанализировали вклады всех колебательных мод в электросопротивлении кристаллов калия. Этот анализ дал неожиданные результаты. В кристаллах калия при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T << \theta_D$), где сопротивление следует зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5$, вклад квазипоперечных фононов в электросопротивление, который ранее не учитывали, в 11.5 раза превышает вклад Lфононов. Однако при температурах, гораздо больших температуры Дебая (T>> θ_D), где ρ_{e-} $_{ph}(T) \approx B_2 T$, вклад *L*-фононов в релаксацию электронов оказался в 4 раза большим, чем суммарный вклад в релаксацию на быстрой и медленной поперечных модах. Очевидно теория Блоха-Грюнайзена нуждается в существенной переработке, связанной с учетом влияния анизотропии упругой энергии на электронный транспорт.

Одной из проблем электрон-фононной релаксации в металлах является анализ роли сдвиговых волн в электросопротивлении кристаллов калия. В нашей работе [50] показано, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения. Он составляет от 28 до 40% термоэдс увлечения для образцов с различной концентрацией дислокаций и в 4-6 раз превышает вклад продольных фононов. Анализ электросопротивлении кристаллов калия показал, что релаксация электронов на сдвиговой компоненте медленной t_2 -моды при низких температурах играет значительную роль. Она обеспечивает 32% полного электросопротивления и в 4 раза превышает вклад продольных фононов и поэтому должна учитываться при анализе. Другой проблемой, по которой нет корректного понимания в научной литературе (см. [19-25]), является учет неупругости электрон-фононного рассеяния при расчете электросопротивления металлов. В

ряде монографий [21-24] утверждается, что неупругостью электрон-фононного рассеяния в металлах можно пренебречь, поскольку энергия Ферми гораздо больше энергии фонона $\hbar \omega_q^{\lambda}$ и теплового размытия уровня Ферми k_BT . В нашей работе [51] определена функция распределения по энергии наиболее актуальных для электросопротивления фононов. Показано, что она имеет максимум при параметре неупругости $Z_q^{\lambda} = \hbar \omega_q^{\lambda} / (k_BT) \approx 5$. Поэтому разложение интеграла столкновений по параметру неупругости является некорректным: оно приводит к расходящимся рядам. В [51] нами показано, корректный учет неупругости рассеяния при низких температурах приводит к увеличению электросопротивления в 5 раз по сравнению с упругим приближением, что согласуется с результатом вариационного метода [22].

Рассмотрим баланс импульса в системе электронов, взаимодействующих с фононами в изотермических условиях. Электрическое поле считается достаточно слабым, чтобы можно было ограничиться линейным приближением. Будем предполагать, как и в теории Блоха-Грюнайзена [19-25], что подсистема фононов остается в равновесии, а для подсистемы электронов реализуется дрейфовое локально равновесное состояние, которое можно описать в гидродинамическом приближении [167-169]:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{u}_{e}) = f_{\mathbf{k}} = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon_{k} - \zeta - \hbar \mathbf{k}\mathbf{u}_{e}}{k_{B}T}\right) + 1\right)^{-1} = f_{0}(\varepsilon_{k}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} = (\hbar \mathbf{k}\mathbf{u}_{e})\left(\frac{\partial f_{0}}{\partial\varepsilon_{k}}\right).$$
(4.23)

Здесь $f_0(\varepsilon_k)$ - функция Ферми. Дрейфовая скорость электронов **u**_e определяется из уравнения баланса импульса электронов, которое получается из уравнения (4.5а). Умножим (4.5а) на $\hbar \mathbf{k}$ и просуммируем по импульсам электронов, тогда получим:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}^{\alpha}\frac{e}{\hbar}E^{\beta}\nabla^{\beta}_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}} = -en_{e}E^{\alpha} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}\left\{I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}},N_{q}^{\lambda})\right\} + I_{eph}(f_{\mathbf{k}},N_{q}^{\lambda})\right\} \quad .$$

$$(4.24)$$

Интеграл столкновений электронов с фононами *I_{eph}* определен выражением (4.6) (см. также [48, 145, 139]). Для рассеяния на примесях имеем:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) = -\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}(\hbar\mathbf{k}\mathbf{u}_{e})\nu_{ei}(k)\left(\frac{\partial f_{0}}{\partial\varepsilon_{k}}\right) = -\mathbf{u}_{e}m_{F}n_{e}\cdot\nu_{ei}(k_{F}) .$$

$$(4.25)$$

Для рассеяния на фононах имеем:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}I_{eph}(f_{\mathbf{k}},N_{\mathbf{q}}) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}\frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q},\lambda}\left|C_{q}^{\lambda}\right|^{2}\left\{\left[f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{k}})(N_{\mathbf{q}}^{\lambda}+1)-f_{\mathbf{k}}(1-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^{\lambda}\right]\times\right.$$

$$\times\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{k}}-\hbar\omega_{q}^{\lambda})-\left[f_{\mathbf{k}}(1-f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})(N_{\mathbf{q}}^{\lambda}+1)-f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{k}})N_{\mathbf{q}}^{\lambda}\right]\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega_{q}^{\lambda})\right\}.$$

$$(4.26)$$

При суммировании по **k** во второй квадратной скобке произведем замену **k**- **q** на **k** и **k** на $\mathbf{k} + \mathbf{q}$, тогда:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}I_{eph}(f_{\mathbf{k}},N_{\mathbf{q}}) = -\frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{q},\lambda}\hbar q^{\alpha} \left|C_{q}^{\lambda}\right|^{2} \left\{ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{k}})(N_{\mathbf{q}}^{\lambda}+1) - f_{\mathbf{k}}(1-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^{\lambda} \right\} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\hbar\omega_{q}^{\lambda}) \right\}.$$
(4.27)

Отличный от нуля результат в (4.27) дадут только члены, содержащие *f*_{k+q}. Подставим (4.23) в (4.27), тогда в линейном приближении по дрейфовой скорости получим:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}_{\alpha}I_{eph}(f_{\mathbf{k}},N_{\mathbf{q}}) = \mathbf{u}_{e}^{\alpha}\frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{q},\lambda}\frac{1}{3}(\hbar q)^{2} \left|C_{q}^{\lambda}\right|^{2}\frac{\partial f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\left[(1-f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}}))(N_{\mathbf{q}}^{\lambda}+1)-f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}})N_{\mathbf{q}}^{\lambda}\right]\times \\
\times\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\hbar\omega_{q}^{\lambda}).$$
(4.28)

Из уравнений баланса импульса электронов (4.26) и (4.28) находим:

$$|e|n_{e}E^{\alpha} = m_{F}n_{e}u^{\alpha} [v_{eph}(k_{F}) + v_{ei}(k_{F})].$$
(4.29)

Здесь $V_{eph}(k_F, T)$ - скорость релаксации импульса электронов на фононах

$$\nu_{eph}(k_F,T) = \frac{m_F^2}{6\pi^3\hbar^3 n_e} \sum_0 d\Omega_q \left| C_0^{\lambda} \right|^2 \left(q_T^{\lambda} \right)^5 \int_0^{Z_{D\lambda}} dZ_q^{\lambda} (Z_q^{\lambda})^4 N_{q\lambda}^0 \int \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{k_B T} \cdot f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \left[1 - f_0 \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_q^{\lambda} \right) \right], \quad (4.30)$$

$$q_T^{\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar S^{\lambda}(\theta,\varphi)}.$$

Рассеяние на примесях обеспечивает выход температурных зависимостей на постоянное значение. Мы не будем рассматривать этот эффект, а сосредоточимся на анализе фононной части электросопротивления, для которой имеем:

$$\rho_{e-ph}(T) = (m_F / e^2) v_{eph}(k_F, T)$$
(4.31)

Электросопротивление представим в виде произведения угловой части B_{Ω}^{λ} на интеграл B_{Z}^{λ} от функции распределения наиболее эффективных для неё фононов $\Phi(Z_{q}^{\lambda})$:

$$\rho_{e-ph}(T) = \sum_{\lambda} B_{\Omega}^{\lambda}(T) B_{Z}^{\lambda}, \qquad B_{\Omega}^{\lambda}(T) = \frac{(m_{F})^{2} (k_{B}T)^{5}}{6\pi^{3} \hbar^{7} e^{2} \rho n_{e}} \int_{0}^{s} d\Omega_{q} \frac{\left(E_{eff}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2}}{\left\{S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right\}^{6}}, \\
B_{Z}^{\lambda} = \int_{0}^{Z_{D\lambda}} dZ_{q}^{\lambda} \Phi(Z_{q}^{\lambda}), \qquad \Phi(Z_{q}^{\lambda}) = (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{k_{B}T} \cdot f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \left[1 - f_{0}\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{q}^{\lambda}\right)\right] \tag{4.32}$$

При низких температурах, гораздо меньших температуры Дебая (для калия $\theta_D = 90.6$ K), верхний предел интегрирования по Z_D^{λ} можно распространить до бесконечности для всех мод. Тогда коэффициент B_Z^{λ} не зависит от поляризации λ и его можно вынести из-под углового интеграла. В этом случае электросопротивление следует зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx \sum_{\lambda} B_1^{\lambda} T^5$, а соотношение вкладов различных мод определяется отношениями угловых коэффициентов: $B_1^{\prime 2}: B_1^{\iota}: B_1^{\iota} = 0.9: 0.08: 0.02$. Как видно из формулы (4.32), доминирующая роль t_2 -моды в электросопротивлении калия обусловлена анизотропией упругой энергии. Отношение коэффициентов $B^{\lambda}_{\Omega}(T)$ для медленной t_2 -моды и *L*-фононов имеет вид:

$$B_{\Omega}^{\prime 2} / B_{\Omega}^{L} = \frac{\left\langle \left(E_{eff}^{\prime 2}(\theta, \varphi) \right)^{2} / \left\{ S^{\prime 2}(\theta, \varphi) \right\}^{6} \right\rangle}{\left\langle \left(E_{eff}^{L}(\theta, \varphi) \right)^{2} / \left\{ S^{L}(\theta, \varphi) \right\}^{6} \right\rangle}.$$
(4.33)

Квадрат эффективной константы связи для продольных фононов с электронами $\langle (E_{eff}^L)^2 \rangle$ в 25 раз больше, чем для медленной t_2 -моды. Однако в направлениях типа [110] фазовая скорость t_2 -моды в 4 раза меньше, чем для *L*-фононов, а отношение усредненных значений равно $\langle S^L \rangle / \langle S'^2 \rangle = 2.54$. Шестая степень этого отношения дает величину на два порядка большую. В результате вычисления угловых средних в (4.33) при низких температурах имеем: $B_{\Omega}^{t2} / B_{\Omega}^L \approx 11.5$. Для термически возбужденных фононов с одной и той же энергией среднее значение волнового вектора t_2 -моды в 2.5 раза больше, чем для продольных фононов, и t_2 -мода вносит доминирующий вклад в релаксацию электронного импульса. Поэтому вклад квазипоперечных мод в электросопротивление составляет 92%, тогда как для продольных фононов -8%.

Гидродинамическое приближение позволяет нам ввести функцию распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов и избежать некорректной процедуры разложения функций Ферми $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar \omega_q^{\lambda})$ по параметру неупругости $Z_a^{\lambda} = \hbar \omega_q^{\lambda} / (k_B T)$. Рассмотрим более подробно влияние неупругости в электрон-фононном рассеянии на электросопротивление металлов, поскольку в научной литературе по этой проблеме нет корректного понимания [21-23]. В ряде монографий [71, 125] утверждали, что неупругостью электрон-фононного рассеяния в металлах можно пренебречь, поскольку энергия Ферми гораздо больше энергии фонона $\hbar \omega_a^{\lambda}$ и k_BT. В монографиях Займана [21, 23] утверждается, что, поскольку энергия падающего и рассеянного фонона лежат в пределах теплового размытия энергии Ферми, то они отличаются на величину k_BT , которая гораздо меньше ε_F , поэтому можно пренебречь их различием. Утверждение о том, что энергия Ферми ε_F в металлах гораздо больше энергии фонона $\hbar \omega_q^{\lambda}$ и $k_B T$, не вызывает сомнения, однако эти неравенства не имеют отношения к критерию учета или пренебрежения неупругостью электрон-фононного рассеяния. Дело в том, что в интеграл столкновений входят функции Ферми $f_0(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} \pm \hbar \omega_q^{\lambda})$, а параметром неупругости является величина $Z_q^{\lambda} = \hbar \omega_q^{\lambda} / (k_B T)$, которую нужно сравнивать с величиной $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T)$. Для электронов на уровне Ферми $y_k=0$, а в пределах теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \le 1$. Релаксация импульса электронов обеспечивается всеми термически активированными фононами, а максимальный вклад в электросопротивление вносят фононы с наибольшим волновым вектором, допускаемым функцией Планка. Для теплоемкости функция распределения термически активированных фононов, согласно [16, 51, 52], определяется выражением $J_{tql}(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda}(N_q^{\lambda}+1)$ (см. рисунок 4.7, кривая 3). Эта функция достигает максимума при $Z_q^{\lambda} = 4$, а при больших значениях Z_q^{λ} она ограничивается функцией распределения Планка. Поэтому для теплоемкости она отлична от нуля в актуальном интервале $1 < Z_q^{\lambda} < 9$. Функция распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов при учете неупругости рассеяния электронов определяется выражением (4.32). Из рисунка 4.7 видно, что эта функция (кривая 1) достигает максимума при $Z_q^{\lambda} = 5$ и быстро убывает при $Z_q^{\lambda} > 12$ за счет функции распределения Планка. Следует отметить, что кривая 1 практически совпадает со штриховой кривой 4 ($J_s(Z_q^{\lambda})$), полученной для электросопротивления при решении задачи вариационным методом [20-23]. В упругом приближении мы получаем кривую 2, которая близка к функции распределения фононов для теплоемкости (см. рисунок 4.7, кривые 2 и 3). Таким образом, во-первых, наиболее актуальные



Рисунок 4.7 – Функции распределения наиболее эффективных электросопротивления фононов от параметра Z_q^{λ} : кривая 1 - $\Phi(Z_q^{\lambda})$ (для неупругого рассеяния электронов), кривая 2 - $J_{4el}(Z_q^{\lambda})$ (для упругого рассеяния электронов), кривая 3 - $J_4(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$ (для теплоемкости), определяется штриховая кривая 4 выражением $J_5(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^5 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$, полученным электросопротивления при расчете вариационным методом [50-52].

для электросопротивления фононы распределены в интервале $1 < Z_q^{\lambda} < 12$ с максимумом при $Z_q^{\lambda} \approx 5$. Для них неравенство $Z_q^{\lambda} << 1$ не выполняется. Более того, для актуальных фононов в области теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \leq 1$ выполняется противоположное неравенство: $|y_k| = |(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/(k_BT)| << Z_q^{\lambda}$. Поэтому основной вклад в электросопротивление при низких температурах вносят не «вертикальные» переходы с энергиями фононов $\hbar \omega_q^{\lambda} \approx (k_BT)$ или «горизонтальные» переходы по терминологии Займана [21, 23], для которых волновой вектор $q \sim k_F$, а «косые» переходы, для которых $k_BT \leq \hbar \omega_q^{\lambda} \leq 12k_BT$ (см. рисунок 4.8). Следует отметить, что разложение интегралов столкновений (4.6) по параметру неупругости Z_q^{λ} , как это сделано в [170] (см. формулы (2) и (3) в [170]), является некорректным для металлов, так как приводит к



Рисунок 4.8 – Схема, иллюстрирующая (а) «вертикальные» $\mathbf{k}_1 \longrightarrow \mathbf{k}'_1 + \mathbf{q}_1$, (б) «горизонтальные» $\mathbf{k}_2 \longrightarrow \mathbf{k}'_2 + \mathbf{q}_2$ и (с) «косые» переходы $\mathbf{k}_3 \longrightarrow \mathbf{k}'_3 + \mathbf{q}_3$.

расходящимся рядам. Для коэффициентов B_Z^{λ} в приближении упругого B_{Zel}^{λ} и неупругого B_{Znel}^{λ} рассеяния имеем:

$$B_{Zel}^{\lambda} = \int_{0}^{\infty} dZ_{q}^{\lambda} (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{k_{B}T} \cdot f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f_{0}(\varepsilon_{\mathbf{k}})] = 24.9,$$

$$B_{Znel}^{\lambda} = \int_{0}^{\infty} dZ_{q}^{\lambda} \Phi(Z_{q}^{\lambda}) = 124.4, \quad B_{Znel}^{\lambda} : B_{Zel}^{\lambda} \approx 5.$$
(4.34)

Итак, учет неупругости приводит к увеличению электросопротивления в 5 раз, по сравнению с приближением упругого рассеяния. При этом качественно зависимость электросопротивления калия от температуры в режиме Блоха-Грюнайзена для всех колебательных мод сохраняется: при низких температурах T<10 К – рассеяние неупругое и следует зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5$, а при высоких температурах - рассеяние упругое и следует зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_2 T$. Далее в принятой нами модели электрон-фононного взаимодействия сравним результаты расчета температурных зависимостей электросопротивлении кристаллов калия с экспериментальными данными (см. рисунок 4.9). Отметим наиболее интересный результат. Нами показано, что в кристаллах калия при низких температурах *T*<10 К, где согласно теории Блоха-Грюнайзена [16-19] электросопротивление следует зависимости T⁵, вклад квазипоперечных фононов в электросопротивление, который ранее не учитывали, оказался на порядок величины больше, чем вклад продольных фононов (см. рисунок 4.8). В этой области температур вклад поперечной компоненты медленной t2-моды в релаксацию электронов в 4 раза превышает вклад продольных фононов И должен учитываться при анализе электросопротивления калия. Однако с увеличением температуры вклад *L*-фононов в электросопротивление возрастает значительно быстрее, чем вклад медленной t2-моды, и при температурах выше 25 К он уже преобладает (см. рисунок 4.10). С дальнейшим повышением температуры вклад продольных фононов начинает доминировать и при комнатной температуре



Рисунок 4.9 – Температурные зависимости электросопротивления - кривые 1, 1a, a также вкладов в него от продольных фононов- кривые 2, 2a, медленных - кривые 3, 3a и быстрых квазипоперечных фононов - кривые 4, 4a в кристалле калия. Символы - экспериментальные данные работ [171-173]. Сплошные кривые 1, 2, 3 и 4 расчет при учете продольной и сдвиговой компоненты взаимодействия (6). Штриховые кривые 1a, 2a, 3a и 4a расчет при учете только продольной компоненты для всех колебательных мод.



Рисунок 4.10 Температурные зависимости относительных вкладов В $\rho_{e-ph}^{\lambda}(T)/\rho_{e-ph}(T)$ электросопротивление кристаллов калия: кривая 1 продольных вклад фононов, 2 -полный вклад медленной *t*₂-моды И кривая 3 вклад продольной компоненты медленной *t*₂-моды.

достигает 82%, тогда как вклад медленной *t*₂-моды уменьшается до 15%, а вклад быстрой поперечной моды составляет всего 3%. Доминирующая роль медленной *t*₂-моды в электросопротивлении кристаллов калия при низких температурах имеет простое физическое

объяснение. t2-мода имеет минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированной энергии фонона (см. рисунок 4.5). Поэтому она вносит электросопротивление. Соотношение максимальный вклад В вклалов имеет вил: $\rho_{e-ph}^{t^2}: \rho_{e-ph}^{L}: \rho_{e-ph}^{l}: 0.08: 0.02.$ При этом релаксация на продольной компоненте медленной t_2 -моды обеспечивает 58% электросопротивления, тогда как сдвиговая компонента дает 32%. Вклад медленной t₂-моды в 4 раза превышает вклад L-фононов. При сравнении вкладов различных колебательных мод в электрон-фононную релаксацию и электросопротивление следует учесть, что электросопротивление определяется усредненной величиной угла между падающим и рассеянным электроном, которое пропорционально импульсу фонона. Поэтому чем больше импульс фонона при фиксированной энергии, тем больше его вклад в электросопротивление.

Как видно из рисунка 4.5, медленная поперечная мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированной энергии фонона, вносит максимальный вклад в электросопротивление. Так, например, в направлениях типа [110] при одной и той же энергии волновой вектор *t*₂-моды в 4 и 2.5 раза больше, чем для продольных фононов и быстрой поперечной моды. Именно этим обстоятельством обусловлен преобладающий вклад медленной t2-моды в электросопротивление и решеточную теплоемкость монокристаллов калия при низких температурах. Из сравнения результатов расчета с данными эксперимента [170-173] видно, что при температурах выше 40 К они хорошо согласуются (см. рисунок 4.9). Это объясняется тем, что весь импульс, получаемый фононами в нормальных процессах электрон-фононного рассеяния, релаксирует внутри фононной системы за счет процессов фонон-фононного переброса. Эти процессы активируются при температурах порядка θ_{D}/γ , где γ -(2-3) [30]. Этот результат свидетельствует о том, что учет влияния анизотропии упругой энергии на фононную систему, а также вклада сдвиговых волн в электрон-фононную релаксацию позволяют согласовать результаты расчета электросопротивления с экспериментальными данными [170-172] без использования подгоночных параметров. При более *T*<30 К. процессы низких температурах во-первых, фонон-фононного переброса вымораживаются, но возрастает роль процессов электрон-фононного переброса, что приводит к увеличению электросопротивления кристаллов калия по сравнению с результатами расчета [30, 165, 171]. Температура активации этих процессов составляет 20 К, а максимальную роль они играют в интервале 5-10 К (см. монографию [159]). Согласно данным по термоэдс [155-159], а также нашему анализу в работах [47-50], процессы электрон-фононного переброса вымораживаются при температурах T<5 К. Во-вторых, согласно нашим оценкам, при температурах ниже 10 К становятся актуальными процессы обратной передачи неравновесного импульса от фононов к электронам, т.е. процессы взаимного увлечения электронов и фононов
[51,52]. Естественно, что эффект взаимного увлечения электронов и фононов приводит уменьшению электросопротивления кристаллов калия. В результате в температурном интервале от 2.5 до 30 К данные эксперимента [171-173] оказываются заметно выше теоретических значений (см. рисунок 4.9). Следует отметить, что в интервале от 1.5 до 2 К результаты расчета электросопротивления кристаллов калия согласуются с результатами эксперимента, что указывает на доминирующую роль нормальных процессов электрон-фононного рассеяния и в термоэдс увлечения в этом интервале.

Для учета взаимного увлечения электронов и фононов в упруго анизотропных кристаллах необходимо проанализировать взаимный обмен импульса между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям колебательных мод. Очевидно, что решение этой задачи, а также анализ роли процессов электрон-фононного переброса с участием квазипоперечных и квазипродольных мод представляют самостоятельную проблему, требующую отдельного рассмотрения.

4.5 Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия

В настоящем разделе рассмотрено влияние анизотропии упругой энергии на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия в изотермических условиях. В гидродинамическом приближении проанализирован обмен импульсом между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям колебательного спектра. Учтены актуальные механизмы релаксации импульса фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. Показано, что в предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха-Грюнайзена, а скорости дрейфа фононов и электронов близки и определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния. В противоположном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния и фононная система остается в равновесии, то электросопротивление следует теории Блоха-Грюнайзена. В этом случае скорости дрейфа всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов. Изложение этого раздела основано на работе [52].

Мы учли наиболее актуальные процессы релаксации фононов: рассеяние на границах образца, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса, и проанализировали взаимное увлечение электронов и фононов в кристаллах калия с различной концентрацией дислокаций. Для решения этой задачи в работе [52] использовано гидродинамическое приближение [167-169]:

рассмотрена релаксация и обмен импульсами между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям фононного спектра в изотермических условиях. Вычислен поток заряда в металле, обусловленный действием постоянного электрического поля. Исходной является система кинетических уравнений для неравновесных электронной f(k,r) и фононной $N^{\lambda}(q,r)$ функций распределения (уравнения (4.5) и (4.6)). Полная скорость релаксации фононов $v_{ph}^{(0,a)}$ включает все неэлектронные механизмы релаксации: рассеяние на границах образца, дислокациях, дефектах и изотопическом беспорядке, в процессах фонон-фононного переброса. Интегралы столкновений электронов с фононами I_{eph} и фононов с электронами I_{phe} определены уравнениями (4.6). Схема, описывающая релаксацию импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе приведена на рисунке 4.11. Неравновесный импульс электронов, полученный от электрического поля, релаксирует на примесях и дефектах, а в нормальных процессах электрон-фононного рассеяния часть этого импульса передается фононам и обеспечивает их дрейфовое движение. Если весь импульс, переданный фононам, полностью релаксирует в резистивных процессах рассеяния фононов: при рассеянии на границах образца,



Рисунок 4.11 – Схема, иллюстрирующая релаксацию импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе в гидродинамическом приближении.

дефектах, изотопическом беспорядке, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса, то система фононов остается в равновесии, как это предполагается в теории Блоха-Грюнайзена [20-25]. В этом случае нормальные процессы электрон-фононного рассеяния обеспечивают релаксацию электронной системы к дрейфовому локально равновесному состоянию и, соответственно, вместе с примесями и дефектами при $T >> \Theta_D$ обуславливают линейную по температуре зависимость электросопротивления металла. Поскольку в совершенных кристаллах калия при достаточно низких температурах процессы фонон-фононного переброса выморожены, то только малая часть неравновесного импульса, полученного фононами, релаксирует на примесях, дефектах и дислокациях, а большая часть возвращается обратно в электронную подсистему. В отличие от теории Блоха-Грюнайзена, мы учли влияние анизотропии упругой энергии на релаксацию фононов и проанализировали вклады всех колебательных мод в электросопротивление кристаллов калия. Как показано в [47-52], основную роль в этой

релаксации играют медленные квазипоперечные фононы. Ограничимся линейным приближением по внешним возмущениям и представим функции распределения электронов и фононов в виде [47, 52, 144-149]:

$$f_{\mathbf{k}} = f_0(\varepsilon_k) + \delta f_{\mathbf{k}}, \qquad N_{\mathbf{q}}^{\lambda} = N_{q\lambda}^0 + g_{\lambda}(\mathbf{q}), \tag{4.35}$$

где $f_0(\varepsilon_k)$ и $N_{q\lambda}^0$ – равновесные функции распределения электронов и фононов, δf_k и $g_\lambda(\mathbf{q})$ – неравновесные добавки к ним. Линеаризуем интегралы столкновений, определенные выражениями (4.6), по этим добавкам. Рассмотрим баланс импульса в системе электронов, взаимодействующих с примесями и фононами в изотермических условиях. Электрическое поле считается достаточно слабым, чтобы можно было ограничиться линейным приближением. Предполагаем, что для подсистем электронов и фононов реализуется дрейфовое локально равновесное состояние, которое можно описать в гидродинамическом приближении [51, 52, 149, 167-169]:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{u}) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon_k - \zeta - \hbar \mathbf{k} \mathbf{u}_e}{k_B T}\right) + 1\right)^{-1} = f_0(\varepsilon_k) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} = (\hbar \mathbf{k} \mathbf{u}_e) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right).$$
(4.36)

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_{\lambda}) = N_{q\lambda}^{0} + g_{\lambda}(\mathbf{q}), \qquad g_{\lambda}(\mathbf{q}) = \left\{\frac{\hbar \mathbf{q} \mathbf{u}_{\lambda}}{k_{B} T_{0}}\right\} N_{q\lambda}^{0} (N_{q\lambda}^{0} + 1).$$

$$(4.37)$$

Здесь \mathbf{u}_e и \mathbf{u}_{λ} – дрейфовые скорости электронов и фононов, которые определяются из связанной системы уравнений баланса импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе. Итак, при гидродинамическом описании электронного переноса в упруго анизотропных металлах электронный поток взаимодействует с тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям фононного спектра. Для получения уравнений баланса умножим уравнения (4.5а) и (4.5б) на $\hbar \mathbf{k}$ и $\hbar \mathbf{q}$ и просуммируем по импульсам квазичастиц, тогда получим:

$$\frac{1}{V}\sum_{k,\sigma}\hbar\mathbf{k}\left\{I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^{0}) + I_{eph}(f_{0}(\varepsilon_{k}), g_{\lambda}(\mathbf{q}))\right\} = m_{F}n_{e}\sum_{\lambda}\left\{\mathbf{u}_{e}^{\alpha}\boldsymbol{v}_{eph(\delta f)}^{\lambda}(k_{F}) - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha}\boldsymbol{v}_{eph(g)}^{\lambda(B)}(k_{F})\right\}.$$
(4.38)

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}}\hbar\mathbf{q}^{\alpha}\left\{I_{phe}(\partial f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^{0}) + I^{\lambda}{}_{phe}(f_{0}(\varepsilon_{k}), g_{\lambda}(\mathbf{q}))\right\} = m_{F}n_{e}\left\{\mathbf{u}_{e}^{\alpha}\widetilde{V}_{phe(\delta)}^{\lambda}(k_{F}) - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha}\widetilde{V}_{phe(g)}^{\lambda(B)}(k_{F})\right\}.$$
(4.39)

Первые слагаемые в выражениях (4.38) и (4.39) учитывают передачу импульса от неравновесных электронов к фононам, а вторые - от неравновесных фононов к электронам. Отметим, что скорости релаксации в электрон-фононных и фонон-электронных процессах рассеяния равны между собой: $v_{eph(\tilde{g})}^{\lambda}(k_F) = \tilde{v}_{phe(\tilde{g})}^{\lambda}(k_F)$ и $v_{eph(g)}^{\lambda(B)} = \tilde{v}_{phe(g)}^{\lambda(B)}$. Они могут быть представлены в виде:

$$v_{eph(\delta f)}^{\lambda}(k_{F}) = \tilde{v}_{phe(\delta f)}^{\lambda}(k_{F}) = \frac{(m_{F})}{24\pi^{4}\hbar^{3}n_{e}} \int d\Omega |C_{0}^{\lambda}|^{2} (q_{T\lambda})^{5} \int dZ_{q}^{\lambda} (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int dy_{\mathbf{k}} [(f_{0}(y_{\mathbf{k}})(1 - f_{0}(y_{\mathbf{k}} + Z_{q}^{\lambda})))] = 0$$

$$= \frac{(m_{F})}{24\pi^{4}\hbar^{3}n_{e}} \frac{1}{\rho} \left(\frac{k_{B}T}{\hbar}\right)^{5} \Phi_{\Omega}^{\lambda} \cdot J_{eph(\mathcal{G})}(Z_{D}^{\lambda}), \qquad \Phi_{\Omega}^{\lambda} = \left\langle\frac{(E_{eff}^{\lambda})^{2}}{\left[S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right]^{6}}\right\rangle_{\Omega_{q}} = \int_{0}^{\pi} \sin(\theta)d\theta \int_{0}^{2\pi} d\varphi \frac{(E_{eff}^{\lambda})^{2}}{\left[S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right]^{6}},$$

$$J_{eph(\mathcal{G})}^{\lambda} = J_{phe(\mathcal{G})}(Z_{D}^{\lambda}) = \int_{0}^{Z_{D}^{\lambda}} dZ_{q}^{\lambda}(Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int dy_{k} \left[(f_{0}(y_{k})(1 - f_{0}(y_{k} + Z_{q}^{\lambda}))) \right]$$

$$(4.40)$$

$$v_{eph(g)}^{\lambda(B)} = \tilde{v}_{phe(g)}^{\lambda(B)} = \frac{(m_{F})}{24n_{e}\pi^{4}\hbar^{3}} \int d\Omega_{q} (q_{T}^{\lambda})^{5} |C_{0}^{\lambda}| \int_{0}^{Z_{q}^{\lambda}} dZ_{q}^{\lambda^{4}} \left\{ N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0} + 1) \int dy_{k} \left[f_{0}(y_{k}) - f_{0}(y_{k} + Z_{q}^{\lambda}) \right] \right\} =$$

$$= \frac{(m_{F})}{24n_{e}\pi^{4}\hbar^{3}} \frac{1}{\rho} \left(\frac{k_{B}T}{\hbar}\right)^{5} \Phi_{\Omega}^{\lambda} \cdot J_{phe-g}(Z_{D}^{\lambda}), \qquad (4.41)$$

$$J_{phe-g} \left(Z_{D}^{\lambda} \right) = \int_{0}^{Z_{q}^{\lambda}} dZ_{q}^{\lambda^{2}} Z_{q}^{\lambda^{4}} \left\{ N_{q\lambda}^{0}(N_{q\lambda}^{0} + 1) \int dy_{k} \left[f_{0}(y_{k}) - f_{0}(y_{k} + Z_{q}^{\lambda}) \right] \right\}.$$

Гидродинамическое приближение позволяет ввести функции распределения наиболее эффективных фононов для электрон-фононной и фонон-электронной релаксации:

$$\Phi_{eph(\mathcal{F})}(Z_{q}^{\lambda}) = (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int dy_{\mathbf{k}} [(f_{0}(y_{\mathbf{k}})(1 - f_{0}(y_{\mathbf{k}} + Z_{q}^{\lambda})))], \qquad (4.42)$$

$$\Phi_{phe-g}(Z_{q}^{\lambda}) = (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} (N_{q\lambda}^{0} + 1) \int dy_{\mathbf{k}} [f_{0}(y_{\mathbf{k}}) - f_{0}(y_{\mathbf{k}} + Z_{q}^{\lambda})].$$

В предыдущем разделе мы показали, что параметром неупругости электрон-фононной релаксации является $Z_q^{\lambda} = \hbar \omega_q^{\lambda} / (k_B T)$. Он должен сравниваться не с отношением $\varepsilon_F / k_B T$, а с величиной $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / k_B T$. Для электронов на уровне Ферми $y_k = 0$, а в пределах теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \le 1$. Релаксация импульса электронов обеспечивается всеми термически активированными фононами, а их распределение определяется функциями распределения наиболее эффективных для электрон-фононной релаксации $\Phi_{eph(\delta f)}(Z_q^{\lambda})$ и $\Phi_{ph(e_f)}(Z_q^{\lambda})$ (см. рисунок 4.12). Путем несложных преобразований формул (4.42) можно показать,



Рисунок 4.12 — Функции распределения наиболее эффективных фононов от параметра Z_q^{λ} : кривая 1 - $\Phi_{eph(\delta^r)} = \Phi_{phe(g)}$ - для неупругой релаксации электронов и фононов, пунктирная кривая 2 - $\Phi_5(Z^{\lambda}_q) = (Z^{\lambda}_q)^5 N^{\lambda}_q (N^{\lambda}_q + 1)$ - определяет распределение фононов при решении задачи вариационным методом [16, 50-52], кривая 3 – $\Phi_{eph(el)}(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda}$ для упругого рассеяния электронов, кривая 4 - $\Phi_4(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$ (для теплоемкости), кривая 5 – $\Phi_6(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^6 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$ – для фонон-фононных процессов переброса. что функции, описывающие наиболее эффективные для электрон-фононных $\Phi_{eph(\tilde{g})}(Z_q^{\lambda})$ и фононэлектронных $\Phi_{ph(g)}(Z_q^{\lambda})$ процессов рассеяния, совпадают (см. рисунок 4.12, кривые 1). Поэтому скорости релаксации импульса в электрон-фононных и фонон-электронных процессах рассеяния также оказывается равными: $V_{eph(\tilde{g})}^{\lambda}(k_F) = \tilde{V}_{phe(g)}^{\lambda(B)}$. В связи с этим вклады различных мод в электрон-фононную и фонон-электронную релаксацию импульса квазичастиц будут совпадать. Соотношение вкладов в скорости релаксации импульса фононов на электронах $\tilde{V}_{phe}^{\lambda}$ при низких температурах имеет вид: $\tilde{V}_{phe}^{12} : \tilde{V}_{phe}^{11} = 0.9 : 0.08 : 0.02$. Доминирующая роль t_2 -моды в этой релаксации обусловлена анизотропией упругой энергии калия. Соотношение интенсивности релаксации импульса медленной t_2 -моды и *L*-фононов имеет вид (см. (4.33)):

$$\frac{\widetilde{V}_{phe}^{t\,2}}{\widetilde{V}_{phe}^{L}} = \frac{\left\langle \left(E_{eff}^{t\,2}(\theta,\varphi) \right)^2 / \left\{ S^{t\,2}(\theta,\varphi) \right\}^6 \right\rangle}{\left\langle \left(E_{eff}^{L}(\theta,\varphi) \right)^2 / \left\{ S^{L}(\theta,\varphi) \right\}^6 \right\rangle} \approx 11.5$$

При этом интегральные части уравнений баланса (4.38) и (4.39) будут равны и пропорциональны разности дрейфовых скоростей электронов и фононов:

$$m_F n_e \sum_{\lambda} v_{eph(\delta f)}^{\lambda} (k_F) \left\{ \mathbf{u}_e^{\alpha} - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha} \right\}.$$
(4.43)

Таким образом, если скорости дрейфа электронов и фононов совпадают, то электрон-фононное взаимодействие не вносит вклад в релаксацию импульса электронов и фононов. Следует отметить, что графики функций $\Phi_{eph(q)}(Z_q^{\lambda})$ и $\Phi_{ph(q)}(Z_q^{\lambda})$ практически совпадают со штриховой кривой 2, которая определяет выражение для функции распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов $\Phi_5(Z_q^{\lambda})$ при решении задачи вариационным методом (см. рисунок 4.12, кривые 1, 2, а также [19-22]). Как видно из рисунка 4.12, функции $\Phi_{eph(q)}(Z_q^{\lambda})$ и $\Phi_{ph(q)}(Z_q^{\lambda})$ (кривая 1) достигают максимума при $Z_q^{\lambda} = 5$ и быстро убывают при $Z_q^{\lambda} > 1.2$ за счет функции распределения Планка. Пренебрегая неупругостью электрон-фононного рассеяния $Z_q^{\lambda} \rightarrow 0$, мы получаем $\Phi_{eph(q)}(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda}$ (см. рисунок 4.12, кривая 2). Расчет интегралов по Z_q^{λ} при низких температурах дает $J_{eph(q)}^{\lambda} = 124.4$, а в упругом приближении $J_{eph(el)}^{\lambda} = 24.9$. Таким образом, учет неупругости электрон-фононного рассеяния приводит к увеличению электросопротивления в 5 раз по сравнению с упругим приближением. Итак, при низких температурах наиболее актуальные для взаимного увлечения фононы распределены в интервале $1 < Z_q^{\lambda} < 12$ с максимумо при $Z_q^{\lambda} \approx 5$. Для них неравенство $Z_q^{\lambda} <<1$ не выполняется. Более того,

для актуальных фононов в области теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \le 1$ выполняется противоположное неравенство: $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F)/(k_BT) << Z_q^{\lambda}$. Поэтому основной вклад во взаимное увлечение при низких температурах вносят не «вертикальные» переходы $\hbar \omega_q^{\lambda} \approx k_B T$ или «горизонтальные» $\hbar \omega_q^{\lambda} >> k_B T$ переходы по терминологии Займана [21, 23], а «косые» переходы, для которых $k_BT \le \hbar \omega_q^{\lambda} \le 12k_B T$ (см. рисунок 4.8). Таким образом, гидродинамическое приближение позволяет корректно учесть неупругость электрон-фононной релаксации в металлах.

Для рассеяния электронов на примесях имеем:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) = -\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\mathbf{k}(\hbar\mathbf{k}\mathbf{u}_{e})v_{ei}(k)\left(\frac{\partial f_{0}}{\partial\varepsilon_{k}}\right) = -\mathbf{u}_{e}m_{F}n_{e}\cdot v_{ei}(k_{F})$$

Из уравнений (4.38) и (4.39) для уравнений баланса импульса в изотермических условиях $\nabla_{\alpha} T(r) = 0$ получим систему четырех алгебраических уравнений для скоростей дрейфа:

$$e\mathbf{E}_{\alpha}n_{e} = m_{F}n_{e}\left[\nu_{ei}(k_{F})\mathbf{u}_{e}^{\alpha} + \sum_{\lambda}\nu_{eph(\delta F)}^{\lambda}(k_{F})\left\{\mathbf{u}_{e}^{\alpha} - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha}\right\}\right],$$

$$-\mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha}R_{\lambda} + m_{F}n_{e}\left(\mathbf{u}_{e}^{\alpha} - \mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha}\right)\widetilde{\nu}_{phe-\delta F}^{\lambda}(k_{F}) = 0.$$
(4.44)

Из (4.44) выразим скорость дрейфа фононов через дрейфовую скорость электронов:

$$\mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha} = \mathbf{u}_{e}^{\alpha} \frac{m_{F} n_{e}^{\alpha} \boldsymbol{v}_{phe-\delta}^{\lambda(2)}(k_{F})}{\left\{ R_{\lambda} + m_{F} n_{e} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{phe-g}^{\lambda(B)}(k_{F}) \right\}} = \mathbf{u}_{e}^{\alpha} \frac{1}{\left\{ 1 + \left(R_{\lambda} / m_{F} n_{e} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{phe-g}^{\lambda(B)}(k_{F}) \right) \right\}}.$$
(4.45)

Величина R_{λ} включает все неэлектронные механизмы релаксации импульса фононов: рассеяние на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса [7]:

$$R_{\lambda} = \frac{\left(k_{B}T\right)^{4}}{3\left(2\pi\hbar\right)^{3}} J_{5}\left(Z_{D}^{\lambda}\right) \left(\frac{\nu_{phB}^{\lambda}(\theta,\varphi)}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{5}}\right)_{\Omega} + \frac{\nu_{phd}^{*\lambda}\left(k_{B}T\right)^{5}}{\hbar 3\left(2\pi\hbar\right)^{3}} J_{5}\left(Z_{D}^{\lambda}\right) \left(\frac{1}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{5}}\right) +$$
(4.46)

$$+\frac{\left(k_{B}T\right)^{\prime}}{\hbar^{3}3(2\pi)^{3}}A_{U}^{\lambda}\cdot\exp\left(-\frac{C_{U}^{\lambda}}{T}\right)\cdot J_{6}^{\lambda}(Z_{D}^{\lambda})\left\langle\frac{1}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{5}}\right\rangle, \qquad J_{N}\left(Z_{D}^{\lambda}\right)=\int_{0}^{Z_{qD}^{\lambda}}dZ_{q}^{\lambda}\left(Z_{q}^{\lambda}\right)^{N}\left\{N_{q\lambda}^{0}\left(N_{q\lambda}^{0}+1\right)\right\}.$$

Скорости релаксации фононов $V_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ при диффузном рассеянии на границах образцов с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями определены в [36], величина $V_{phd}^{*\lambda}$ - в работах [47-50]. Для процессов переброса коэффициент C_{U}^{λ} определяется температурой Дебая для каждой моды: $C_{U}^{\lambda} = T_{D}^{\lambda} / \delta_{\lambda}$, где подгоночный параметр $\delta_{\lambda} \approx (2-3)$, для оценки коэффициента A_{U}^{λ} мы пользуемся способом, описанным в работах [30, 147, 157].

Из системы уравнений (4.44) найдем скорости дрейфа электронов и фононов:

$$\mathbf{u}_{e}^{\alpha} = \frac{e\mathbf{E}_{\alpha}m_{F}}{\widetilde{\nu}_{eR}(k_{F})}, \qquad \widetilde{\nu}_{eR}(k_{F}) = \left\{\nu_{ei}(k_{F}) + \sum_{\lambda}\nu_{eph_{(\delta f)}}^{(\lambda)}(k_{F})\left[1 - \frac{1}{\left\{1 + K_{U}^{\lambda}\right\}}\right]\right\}.$$
(4.47a)

$$\mathbf{u}_{\lambda}^{\alpha} = \frac{e\mathbf{E}_{\alpha}m_{F}}{\widetilde{\nu}_{eR}(k_{F})} \frac{m_{F}n_{e}^{\alpha}\widetilde{\nu}_{phe-\delta f}^{\lambda(2)}(k_{F})}{\left\{R_{\lambda} + m_{F}n_{e}\widetilde{\nu}_{phe-g}^{\lambda(B)}(k_{F})\right\}} = \frac{e\mathbf{E}_{\alpha}m_{F}}{\widetilde{\nu}_{eR}(k_{F})} \frac{1}{\left\{1 + K_{U}^{\lambda}\right\}}, \quad K_{U}^{\lambda} = \left[R_{\lambda}/\left(m_{F}n_{e}\widetilde{\nu}_{phe-g}^{\lambda(B)}\right)\right].$$
(4.476)

Вычислим ток проводимости и определим электросопротивление кристаллов калия:

$$J = -\left|e\right|\mathbf{u}_{e}^{\alpha}n_{e} = -\frac{e^{2}n_{e}}{\left(\widetilde{v}_{eR}(k_{F})\cdot m_{F}\right)}\mathbf{E}_{\alpha}, \qquad \rho_{xx} = \frac{\left(\widetilde{v}_{eR}(k_{F})\cdot m_{F}\right)}{e^{2}n_{e}} = \left(\frac{\left(m_{F}\right)}{e^{2}n_{e}}\right)\left[\sum_{\lambda}\frac{v_{eph\left(\delta F\right)}^{(\lambda)}(k_{F})K_{U}^{\lambda}}{\left\{1+K_{U}^{\lambda}\right\}}\right].$$
(4.48)

Как видно из (4.48), весь эффект от частичной передачи неравновесного импульса от фононов к электронам определяется коэффициентом K_U^{λ} и сводится к перенормировке эффективной скорости релаксации электронов на фононах за счет резистивных механизмов релаксации фононов. Рассеяние на примесях обеспечивает выход электросопротивления на постоянное значение. Мы не будем рассматривать этот эффект, а проанализируем влияние релаксации фононов в резистивных процессах на обмен импульсом внутри электрон-фононной системы и электросопротивление кристаллов калия. Очевидно, что в случае слабого рассеяния фононов в неэлектронных механизмах релаксации $K_U^{\lambda} \ll 1$ электросопротивление кристаллов калия будет значительно меньше, чем дает теория Блоха-Грюнайзена (см. [52]):

$$\rho_{xx} = \left(\frac{(m_F)}{e^2 n_e}\right) \left[\sum_{\lambda} V_{eph_{(\mathcal{F})}}^{(\lambda)}(k_F) K_U^{\lambda}\right] \ll \rho_{xx}^{BG} = \left(\frac{(m_F)}{e^2 n_e}\right) \left[\sum_{\lambda} V_{eph_{(\mathcal{F})}}^{(\lambda)}(k_F)\right].$$
(4.49)

В этом пределе доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации как для электронов, так и для фононов. При этом большая часть импульса неравновесных электронов, переданная фононам, возвращается обратно в электронную систему. В итоге мы получаем довольно любопытный результат: в условиях сильного взаимного увлечения электронов и фононов электросопротивление уже не зависит от электрон-фононной релаксации, а будет полностью определяться резистивными механизмами релаксации фононов: рассеянием на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса:

$$\rho_{xx} = \left(\frac{(m_F)}{e^2 n_e}\right) \sum_{\lambda} V_{eph_{(\delta)}}^{(\lambda)}(k_F) \left[R_{\lambda} / (m_F n_e \tilde{v}_{phe-g}^{\lambda(B)}) \right] = \left(\frac{1}{e^2}\right) \left[\sum_{\lambda} R_{\lambda} \right].$$
(4.50)

В этом случае скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и совпадают со скоростью дрейфа электронов. Они определяются скоростью релаксации импульса фононов в резистивных процессах рассеяния [52]:

$$u_e^{\alpha} \approx u_{\lambda}^{\alpha} \approx \frac{eE_{\alpha}m_F}{\widetilde{\nu}_{eR}(k_F)} \approx eE_{\alpha}m_F \left(\sum_{\lambda}R_{\lambda}\right).$$
(4.51)

В противоположном предельном случае $K_U^{\lambda} >> 1$ большая часть дрейфового импульса, полученного от электронов, релаксирует в резистивных процессах рассеяния внутри фононной системы. Этот случай реализуется при повышении температуры, когда доминируют процессы фонон-фононного переброса. Фононная система остается в равновесии, и мы переходим к приближению Блоха-Грюнайзена [52]:

$$\rho_{xx} = \left(\frac{(m_F)}{e^2 n_e}\right) \left[\sum_{\lambda} V_{eph_{(\widetilde{d}^F)}}^{(\lambda)}(k_F) \left(1 - \left(K_U^{\lambda}\right)^{-1}\right)\right] \approx \left(\frac{(m_F)}{e^2 n_e}\right) \left[\sum_{\lambda} V_{eph_{(\widetilde{d}^F)}}^{(\lambda)}(k_F)\right] = \rho_{xx}^{BG}.$$
(4.52)

В этом случае ($K_U^{\lambda} >> 1$) скорости дрейфа всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов:

$$u_{e}^{\alpha} = \frac{eE_{\alpha}m_{F}}{\widetilde{v}_{eR}(k_{F})} = \frac{eE_{\alpha}m_{F}}{\sum_{\lambda}v_{eph_{(\delta f)}}^{(\lambda)}(k_{F})}, \qquad u_{\lambda}^{\alpha} = \frac{eE_{\alpha}m_{F}}{\widetilde{v}_{eR}(k_{F})}\frac{1}{\{1+K_{U}^{\lambda}\}} \approx \frac{eE_{\alpha}m_{F}}{K_{U}^{\lambda}\left\{\sum_{\lambda}v_{eph_{(\delta f)}}^{(\lambda)}(k_{F})\right\}}, \tag{4.53}$$

 $u_{\lambda}^{\alpha} / K_{U}^{\lambda} \ll u_{e}^{\alpha}.$

Проанализируем температурные зависимости коэффициента перенормировки эффективной скорости релаксации электронов на фононах K_U^{λ} . Как видно из рисунка 4.13,



Рисунок 4.13 – Температурная зависимость коэффициента $K_U^{\lambda} = \left[R_{\lambda} / \left(m_F n_e \tilde{V}_{phe-g}^{\lambda(B)} \right) \right]$ в кристаллах калия для продольных (кривые 1, 2, 3, 4) и медленных t_2 -фононов (кривые 1a, 2a, 3a, 4a). Кривые 1, 1a – для граничного рассеяния, кривые 2, 2a – для граничного рассеяния и процессов переброса, кривые 3, 3a – для рассеяния на границах, дислокациях с минимальной концентрацией N_d =0.03 и в процессах переброса, кривые 4, 4a – для рассеяния на границах, дислокациях с максимальной концентрацией N_d =0.55 и в процессах переброса.

рассеяние фононов на границах образца не может обеспечить равновесие фононной системы: только малая часть неравновесного импульса, полученного фононами от электронов, релаксирует на границах, а большая часть возвращается обратно в электронную подсистему. Для кристаллов калия без дислокаций предельный случай $K_U^{\lambda} << 1$ реализуется для медленной t_2 -моды в интервале температур 1 К <T < 5 К, для *L*-фононов в интервале 1 К <T < 15 К (см. рисунок 4.13, кривые 2, 2а). Поскольку при низких температурах в электросопротивлении доминирует медленная t_2 -мода, то для кристаллов калия предельный случай сильного взаимного увлечения может быть реализован только в интервале 1 К <T < 5 К. Как видно из рисунка 4.13, медленные t_2 -фононы значительно сильнее рассеиваются на дислокациях, чем *L*-фононы. Для кристаллов калия с минимальной концентрацией дислокаций N_d =0.03 при T < 15 К коэффициент K_U^L гораздо меньше единицы (см. рисунок 4.13, кривые 3). Поэтому для *L*-фононов может быть реализован случай сильного взаимного увлечения. В принятой нами модели мы рассчитали температурные зависимости электросопротивления кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций и сравнили результаты расчета с экспериментальными данными (см. рисунок 4.14, кривые 1, 2, 3).



Рисунок 4.14 — Температурные зависимости электросопротивления кристаллов калия: кривые (1, 1a, 1b, 1c) — результаты для теории Блоха-Грюнайзена; кривые (2, 2a, 2b, 2c) - для кристаллов с максимальной концентрацией дислокаций N_d =0.55; (3, 3a, 3b, 3c) - для кристаллов с минимальной концентрацией дислокаций N_d =0.03; кривые 1a, 2a, 3a - вклады *L*-фононов, кривые 1b, 2b, 3b - вклады медленных поперечных, кривые 1c, 2c, 3c - вклады быстрых квазипоперечных фононов. Символы - экспериментальные данные из работ [171-173].

Значения концентраций взяты из работ [50, 51, 158], в которых исследована термоэдс, но не электросопротивление. Как видно из рисунка, для кристаллов калия с максимальной концентрацией дислокаций *N*_d=0.55 температурные зависимости электросопротивления близки к рассчитанным в приближении Блоха-Грюнайзена. Для t2-моды доминируют резистивные процессы рассеяния: при низких температурах за счет дислокаций, а при высоких – за счет процессов фонон-фононного переброса (см. рисунок 4.13, кривые 4, 4a). Для t2-моды коэффициент $K_U^{t_2} >> 1$. Практически весь импульс, поступающий от электронов в t2-моду, при низких температурах релаксирует на дислокациях, а при высоких – в процессах переброса. Для этих кристаллов соотношение вкладов В электросопротивление имеет вид: $\rho_{e-ph}^{t^2}: \rho_{e-ph}^{L}: \rho_{e-ph}^{t^1} = 0.94: 0.035: 0.025.$ Очевидно, что доминируют резистивные процессы рассеяния фононов: при низких температурах за счет дислокаций, а при высоких – за счет процессов переброса (см. рисунок 4.13, кривые 4а). Для t_2 -моды коэффициент $K_U^{t_2} >> 1$. Поэтому *t*₂-мода находится в равновесии и для неё реализуется режим Блоха-Грюнайзена. Для кристаллов калия с минимальной концентрацией дислокаций N_d=0.03 (с деформацией є=0.027) вклад медленной t₂-моды в электросопротивление возрастает до 95%, а соотношение вкладов имеет вид: $\rho_{e-ph}^{t^2}: \rho_{e-ph}^{L}: \rho_{e-ph}^{t^1}: = 0.95: 0.01: 0.04$. При этом вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды возрастает от 32% в модели Блоха-Грюнайзена до 56%. Для кристаллов с $K_u^L \approx 0.5$ скорость релаксации L-фононов в неэлектронных механизмах рассеяния сравнима со скоростью релаксации на электронах. В связи с этим эффект взаимного увлечения оказывает незначительное влияние на полное электросопротивление (см. рисунок 4.14, кривые 1, 2).

Однако с повышением температуры вклад *L*-фононов в электросопротивление быстро возрастает и при *T*>30 К становится больше вклада медленной t_2 -моды. При этом коэффициент K_U^L становится гораздо больше единицы при *T*>40 К (см. рисунок 4.13). Следует отметить, что с повышением температуры главную роль в рассеянии фононов начинают играть процессы фонон-фононного переброса, и при *T*>40 К результаты расчета электросопротивления кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций хорошо согласуются и с теорией Блоха-Грюнайзена, и с результатами измерений для чистых образцов [171-173]. В модели Блоха-Грюнайзена показано, что при низких температурах *T*<10 К вклад медленной t_2 -моды в электросопротивление оказывается на порядок величины больше вклада *L*-фононов, соотношение вкладов имеет вид: $\rho_{e-ph}^{t^2} : \rho_{e-ph}^{L} : \rho_{e-ph}^{t^1} = 0.9:0.08:0.02$ [51, 52]. Как уже отмечали, доминирующая роль медленной поперечной моды в электросопротивлении кристаллов калия при низких температурах обусловлена тем, что она имеет минимальную фазовую скорость и, соответственно,

максимальный волновой вектор при фиксированной энергии фонона (см. рисунок 4.5) и в связи с этим вносит максимальный вклад в электросопротивление. Из формулы (4.40) видно, что отношение коэффициентов $\Phi_{\Omega}^{\lambda}(T)$ для t_2 -моды и *L*-фононов имеет вид:

$$\Phi_{\Omega}^{\prime 2} / \Phi_{\Omega}^{L} = \frac{\left\langle \left(E_{eff}^{\prime 2}(\theta, \varphi) \right)^{2} / \left\{ S^{\prime 2}(\theta, \varphi) \right\}^{6} \right\rangle}{\left\langle \left(E_{eff}^{L}(\theta, \varphi) \right)^{2} / \left\{ S^{L}(\theta, \varphi) \right\}^{6} \right\rangle}$$
(4.54)

Квадрат эффективной константы связи продольных фононов с электронами $(E_{eff}^{L})^2$ в 25 раз больше, чем для медленной поперечной моды. Однако в направлениях типа [110] фазовая скорость t_2 -моды в 4 раза меньше, чем для продольных фононов, а отношение усредненных значений дает $\langle S^L \rangle / \langle S^{\prime 2} \rangle = 2.54$. Шестая степень этого отношения дает величину на два порядка большую. В результате вычисления угловых средних в формуле (4.54) имеем: $\Phi_{\Omega}^{\prime 2} / \Phi_{\Omega}^{L} \approx 11.5$. Для термически возбужденных фононов с одной и той же энергией волновой вектор t_2 -моды в 2.5 раза больше, чем для *L*-фононов, поэтому их вклад в релаксацию электронного импульса на порядок величины превышает вклад *L*-фононов. Следует отметить значительную роль релаксации



Рисунок 4.15 – Температурные зависимости относительных вкладов в электросопротивление кристаллов калия $\rho_{e-ph}^{\lambda}(T)/\rho_{e-ph}(T)$ для медленных квазипоперечных фононов – кривые 2, 2a, 2b, для *L*- фононов - 1, 1a, 1b, для сдвиговой компоненты *t*₂-моды – кривые 3, 3a, 3b; для кристаллов с минимальной концентрацией дислокаций N_d =0.03 – кривые 1, 2, 3, для кристаллов с максимальной концентрацией дислокаций N_d =0.55 – кривые 1b, 2b, 3b, расчет согласно теории Блоха-Грюнайзена кривые – 1a, 2a, 3a.

электронов на сдвиговой компоненте *t*₂-моды, которая обеспечивает 32% электросопротивления кристаллов калия и в 4 раза превышает вклад продольных фононов. Однако с повышением температуры вклад продольных фононов возрастает значительно быстрее, чем вклад медленной

t₂-моды, и при температуре выше 30 К он уже преобладает (см. рисунок 4.15). С дальнейшим повышением температуры при $T \ge \Theta_D^L$ вклад L-фононов доминирует и при комнатной температуре достигает 82%, тогда как вклад медленной *t*₂-моды уменьшается до 15%, а вклад быстрой поперечной моды составляет всего 3% (см. рисунок 4.15). Из сравнения результатов расчета с данными эксперимента [166, 171-173] видно, что при температурах выше 40 К они хорошо согласуются (см. рисунок 4.14). Это объясняется тем, что весь импульс, получаемый фононами в нормальных процессах электрон-фононного рассеяния, релаксирует внутри фононной системы главным образом за счет процессов фонон-фононного переброса. Эти процессы активируются при температурах порядка $\theta_{D}^{\lambda}/\gamma$, где γ -(2-3). Этот результат свидетельствует, что учет влияния анизотропии упругой энергии на фононную систему, а также вклада сдвиговых волн в электрон-фононную релаксацию позволяют согласовать результаты расчета электросопротивления с экспериментальными данными [166, 171-173] без использования подгоночных параметров. Однако с понижением температуры ниже 40 К расхождение результатов расчета с данными эксперимента для образцов калия с различной концентрацией дислокаций возрастает и достигает максимума при T~7-8 К. Это связано с тем, что процессы фонон-фононного переброса вымораживаются, но возрастает роль процессов электронфононного переброса, которые в настоящей работе не учитываются. Температура активации этих процессов составляет 10-20 К, а максимальную роль в электрон-фононной релаксации они играют в интервале 5-10 К [158, 174]. Согласно данным по термоэдс [158], а также анализу [50, 158, 174] процессы электрон-фононного переброса вымораживаются при температурах T<4-5 К, а при T < 2 К уже доминируют нормальные процессы электрон-фононного рассеяния. Поэтому при температурах ниже 30 К учет взаимного увлечения электронов и фононов приводит только к увеличению расхождения результатов расчета и экспериментальных данных. Для их согласования необходимо учитывать процессы электрон-фононного переброса. Очевидно, что анализ этих процессов с учетом анизотропии спектра фононов представляет самостоятельную задачу, требующую отдельного рассмотрения.

Итак, анализ взаимного увлечения электронов и фононов в кристаллах калия показал: 1. В предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов, когда для них доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации, электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха-Грюнайзена. Оно определяется резистивными механизмами рассеяния фононов: на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. В этом пределе (1) скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и близки к скорости дрейфа электронов; (2) они определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния. 2. В противоположном предельном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния и фононная система остается в равновесии, мы имеем предельный случай теории Блоха-Грюнайзена: электросопротивление определяется нормальными процессами электрон-фононной релаксации. В этом случае скорости дрейфа фононов для всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов.

4.6 Выводы

Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения и электросопротивлении кристаллов калия. Основные результаты можно сформулировать следующим образом.

1. Из сопоставления результатов расчета термоэдс и решёточной теплопроводности кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными [158] определена константа связи электронов со сдвиговыми волнами и исследовано влияние этого механизма на электрон-фононную релаксацию и электронный транспорт в кристаллах калия. Учет этого механизма релаксации позволил удовлетворительно согласовать температурные зависимости термоэдс калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными [158] в интервале температур 1-3 К. Показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D$, сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление. В зависимости от концентрации дислокаций их вклады в 4-6 раз превышают вклады продольных фононов.

2. Показано, что вклады медленных квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия, которые ранее не учитывали, при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D$, на порядок величины превышают вклады продольных фононов. Однако при высоких температурах $T >> \theta_D$ вклад продольных фононов в электросопротивление в 4 раза больше, чем суммарный вклад релаксации электронов на быстрой и медленной поперечных модах.

3. Проанализировано влияние неупругости электрон-фононного рассеяния на электросопротивление и термоэдс увлечения кристаллов калия при низких температурах. Определена функция распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов. Показано, что анализ неупругости электрон-фононного рассеяния в электросопротивлении кристаллов калия в гидродинамическом приближении при низких температурах согласуется с результатами, полученными вариационным методом [20-23].

4. Дано физическое объяснение доминирующей роли медленной квазипоперечной моды в термоэдс увлечения и электросопротивлении кристаллов калия при низких температурах. Из анализа и сравнения изоэнергетических поверхностей колебательных мод и их вкладов в электрон-фононную релаксацию было показано, что медленная поперечная мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированном значении энергии фонона, вносит максимальный вклад в термоэдс увлечения и электросопротивления.

5. Показано, что в предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов, когда для них доминируют нормальные процессы электрон-фононной релаксации, электросопротивление будет значительно меньше, чем дает теория Блоха-Грюнайзена. Оно определяется резистивными механизмами рассеяния фононов: на границах, дислокациях и в процессах фонон-фононного переброса. В этом пределе (1) скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и близки к скорости дрейфа электронов; (2) они определяются суммарной скоростью релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния.

6. В противоположном предельном случае, когда для фононов доминируют резистивные процессы рассеяния и фононная система остается в равновесии, мы имеем предельный случай теории Блоха-Грюнайзена: электросопротивление определяется нормальными процессами электрон-фононной релаксации. В этом случае скорости дрейфа фононов для всех мод различны и гораздо меньше скорости дрейфа электронов.

Основные результаты, приведенные в Главе 4, опубликованы в работах [A2, A10, A11, A13, A14, A15, A19, A22, A27].

5 Влияние фокусировки фононов и сдвиговых волн на термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах

Интерес к изучению явлений электронного переноса в наноструктурах на основе кристаллов калия связан с тем, что они имеют аномально большой по сравнению с полупроводниковыми кристаллами параметр анизотропии упругой энергии [35, 54-56]. Поэтому отклонение направлений групповых скоростей от направлений волновых векторов для всех ветвей фононного спектра в кристаллах калия значительно сильнее сказывается на анизотропию плотности фононных состояний и решеточной теплопроводности (см. главу 1). Очевидно, что благодаря электрон-фононному взаимодействию анизотропное распределение фононных потоков, соответствующих различным поляризациям, приведет к анизотропии термоэлектрического тока электронов. В результате термоэдс электрон-фононного увлечения в наноструктурах для направлений фокусировки фононов оказывается значительно больше, чем в направлениях дефокусировки [54-56]. Для проявления этого эффекта необходимо, чтобы рассеяние фононов на границах образцов преобладало над объёмными механизмами рассеяния, главным из которых является электрон-фононная релаксация [47-49, 51]. Очевидно, что для реализации этого эффекта необходимо обеспечить достаточно низкие температуры и иметь наноструктуры достаточно малых размеров, чтобы обеспечить доминирующую роль граничного рассеяния фононов. В работах [47-51] рассчитаны спектр и векторы поляризации фононов и проанализировано влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию в кристаллах калия и термоэдс увлечения в наноструктурах на основе кристаллов калия при низких температурах. Исследована роль квазипродольных и квазипоперечных фононов, а также сдвиговых волн в термоэдс увлечения для наноструктур калия.

Следует отметить, что влияние фокусировки на распространение фононных мод и анизотропию электронного транспорта в монокристаллических наноструктурах на основе калия анализируется в рамках феноменологического метода Казимира–МакКарди [4, 8, 13, 15]. Этот метод предполагает использование трехмерного спектра фононов, поэтому возникают естественные ограничения на минимальные размеры наноструктур: диаметр нанопроводов и толщину пленок, при которых влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод можно пренебречь. Анализ, проведенный в работах [2-7], показал, что для нанопроводов диаметром больше 50 нм и пленок толщиной больше 20 нм теплопроводность в интервале температур от 20 до 50 К следует зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при указанных ограничениях влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод можно пренебречь, и при низких

температурах можно использовать модель анизотропного континуума для фононов. Расчеты и экспериментальные исследования температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов в [41, 42] подтвердили этот вывод.

При исследовании влияния фокусировки фононов на взаимный обмен импульсом в неравновесной электрон-фононной системе для наноструктур в работах [54-56] мы не ограничились анализом зависимостей термоэдс увлечения от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей. Мы зафиксировали температуру 2 К, рассчитали решеточную теплопроводность и определили угловые зависимости длин свободного пробега фононов. Проанализировали термоэдс увлечения и вклады от фононов различных поляризаций для наноструктур калия. Показали, что в режиме кнудсеновского течения фононного газа, когда доминирует граничное рассеяние фононов, угловые зависимости термоэдс увлечения и длин свободного пробега фононов для всех поляризаций качественно согласуются. Этот результат не является удивительным: чем больше длина свободного пробега фонона относительно его рассеяния на границах образца, тем больше вероятность электрона столкнуться с неравновесным фононом и получить дополнительный импульс от градиента температуры.

В работах [54-56] нами исследовано влияние квазипродольных и квазипоперечных фононов, а также сдвиговых волн на термоэдс увлечения в наноструктурах на основе монокристаллов калия. Показано, что в режиме кнудсеновского течения фононного газа медленные квазипоперечные фононы вносят преобладающий вклад в термоэдс увлечения наноструктур, и только в направлениях, близких к фокусировке продольных фононов, их вклад становится сравнимым по величине с вкладом медленной t2-моды. Эти исследования позволили не только глубже понять физику электрон-фононной релаксации в упруго-анизотропных металлах и наноструктурах на их основе, но и получить ряд новых результатов. Рассмотрено изменение анизотропии термоэдс увлечения в пленках и нанопроводах в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов, главным из которых является фононэлектронное рассеяние. Проанализировано изменение анизотропии термоэдс увлечения при увеличении поперечных размеров наноструктур от $D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см и переходе к объёмным монокристаллам. Показано, что с увеличением сечения образца благодаря более сильному рассеянию продольных фононов на электронах анизотропия термоэдс увлечения всех наноструктур изменяется немонотонным образом. При переходе от режима кнудсеновского течения фононного газа она сначала возрастает, достигает максимума, а затем уменьшается и исчезает при переходе к режиму объёмных механизмов релаксации.

Проведенный в работах [54-56] анализ показал, что с уменьшением поперечных размеров наноструктур рассеяние фононов на границах возрастает, а роль объёмных механизмов релаксации уменьшается. При этом температурные зависимости термоэдс увлечения и

решеточной теплопроводности изменяются. Для нанопроводов с поперечными размерами и нанопластин толщиной $D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см, диффузное рассеяние фононов на границах становится более эффективным, чем объёмные механизмы релаксации. Для них реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа. В этом случае термоэдс увлечения $\alpha_{drag}(T)$ и решеточная теплопроводность $\kappa(T)$ наноструктур становятся анизотропными и следуют зависимостям: $\alpha_{drag} \approx B_2 T^4$ и $\kappa(T) \approx CT^3$. При увеличении поперечных размеров роль объёмных механизмов релаксации возрастает, а анизотропия термоэдс увлечения наноструктур определяется конкуренцией граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов, главными из которых являются электрон-фононная релаксация медленных квазипоперечных и квазипродольных фононов [54-56]. Для наноструктур с поперечными размерами D >·10⁻² см уже доминируют объёмные механизмы релаксации фононов – рассеяние на электронах и дислокациях. В этом случае термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность становятся изотропными, они не зависят от геометрических параметров и следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \approx AT^3$ и $\kappa(T) \approx BT^2$ (см. обзор 2 [175]). Расчет вкладов различных мод в термоэдс увлечения наноструктур в режиме кнудсеновского течения фононного газа показал, что медленные квазипоперечные фононы для большинства направлений вносят преобладающий вклад в электрон-фононное увлечение, значительно превышающий вклад продольных фононов [54-56]. Этот эффект имеет простое объяснение. Как уже отмечали [175], термоэдс увлечения определяется импульсом, переданным электронам от потока фононов, обусловленного градиентом температуры. Поэтому медленные фононы, имеющие наименьшую фазовую скорость и наибольший волновой вектор при фиксированной энергии фонона, для большинства направлений вносят максимальный вклад в термоэдс увлечения наноструктур. Исключение составляют направления, близкие к фокусировке продольных фононов [111], где их вклад становится сравнимым с вкладом медленной *t*₂-моды.

5.1 Влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в нанопроводах на основе кристаллов калия

Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в нанопроводах с квадратным сечением $D \times D$ и длиной L >> D. Анализ, проведенный в работе [4], (см. также [38]) показал, что для кремниевых нанопроводов с диаметром большим 50 нм в интервале температур от 20 до 50 К влиянием пространственного конфаймента на спектр акустических мод в нанопроводах можно пренебречь и использовать трехмерную модель анизотропного континуума [42]. В этом случае размерное квантование электронного спектра в калии можно также не учитывать, поскольку поперечные размеры нанопровода D гораздо

больше длины волны электрона: для $\varepsilon_F \approx 2.12$ эВ длина волны фермиевского электрона ~ (10⁻⁸ - 10⁻⁷) см. В условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов термоэдс увлечения в нанопроводах, согласно формуле (4.11), определяется выражением:

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{3}{4\pi}\right) \int d\Omega_q \int_0^\infty dZ_q^{\lambda} \left(Z_q^{\lambda}\right)^4 th \left(Z_q^{\lambda} / 2\left(\frac{v_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{v_{ph}^{\lambda}(q)}\right) \left(\frac{\left(2m_F \left(S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^2\right)}{k_B T}\right) \left(\tilde{V}_{g_3}^{\lambda} n_{q_3}\right),$$

$$v_{ph}^{\lambda}(q, \theta, \varphi) = v_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi) + \frac{k_B T}{\hbar} Z_q^{\lambda} \left[v_{phd}^{*\lambda}(\theta, \varphi) + v_{phe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)\right].$$
(5.1)

Основными механизмами релаксации фононов являются рассеяние на электронах $v_{phe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)$, дислокациях $v_{phd}^{*\lambda}(\theta, \varphi)$ и границах нанопроводов $v_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi)$. В режиме граничного рассеяния термоэдс увлечения определяется выражением:

$$\alpha_{drag} \approx B_2 T^4, \qquad B_2 = 24.1 \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{(m_F)^2 (k_B)^4}{n_e^{-3} \hbar^8} \right) \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \left(\frac{\left(C_0^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^2 \tilde{V}_{g_3}^{\lambda} n_{q_3}}{v_{phB}^{\lambda}(q) \left(S^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^3} \right), \tag{5.2}$$

При вычислении термоэдс увлечения в нанопроводах с квадратным сечением мы будем пользоваться выражениями для скоростей релаксации фононов на границах образцов с квадратным сечением, (см. глава 2, формулы (2.16) - (2.17)). Из этих формул следует, что с уменьшением поперечного размера D скорости релаксации на границах возрастают. Поэтому для реализации кнудсеновского течения фононного газа в нанопроводах необходимо уменьшить поперечные размеры нанопроводов до $D < 10^{-5}$ см, чтобы диффузное рассеяние фононов на границах было более эффективно, чем объёмные механизмы релаксации. Проанализируем угловые зависимости термоэдс увлечения для нанопроводов при вращении градиента температуры в плоскостях {100} и {110}. Для этого определим систему координат с осью «З» вдоль направления теплового потока. В образцах с квадратным сечением оси «1» и «2» взаимно ортогональны и направлены перпендикулярно оси образца и его боковым граням. При этом ось «1» является осью вращения. Тогда компоненты групповой скорости фононов могут быть представлены в следующем виде [38, 41, 54]:

$$(1) V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \qquad V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos \psi + V_{gz}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}.$$

$$(5.5)$$

$$(2) V_{g3}^{\lambda} = \left(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \qquad V_{g2}^{\lambda} = \left(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^{\lambda} \sin \psi, \qquad V_{g1}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) / \sqrt{2}.$$

Ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла определяются компонентами групповой скорости, параллельными и перпендикулярными тепловому потоку. Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой V_{g3}^{λ} . Проекция V_{g1}^{λ} не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения. Мы зафиксировали температуру 2 К и рассчитали угловые зависимости длин

свободного пробега фононов и термоэдс увлечения и вкладов в них от различных ветвей фононного спектра для нанопроводов калия с квадратным сечением $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см и длиной L = 50D при вращении градиента температуры в плоскостях {100} и {110} (см. рисунки 5.1 и 5.2). Из сравнения рисунков 5.1 и 5.2 видно, что для всех мод угловые зависимости термоэдс увлечения и длин свободного пробега качественно согласуются. Следует отметить, что средняя



Рисунок 5.1 – Угловые зависимости длин пробега медленных квазипоперечных фононов (кривые 1), быстрых квазипоперечных (кривые 2), продольных (кривые 3), средних длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{[J]}$ (кривые 4), а также (кривые 5) – для модели изотропной среды, рассчитанные в режиме граничного рассеяния, для образцов калия с квадратным сечением $D=5\cdot10^{-6}$ см и длиной L = 50D в случаях, когда градиент температуры вращается (а) в плоскости грани куба, (б) в диагональной плоскости.



Рисунок 5.2 – Угловые зависимости термоэдс α_{drag} (мкВ/К) (кривые 4), вкладов продольных α_{drag}^{L} (кривые 3), квазипоперечных фононов α_{drag}^{t2} (кривые 2) и α_{drag}^{t1} (кривые 1), а также вкладов от продольной (кривые 2a) и сдвиговой (кривые 2b) компоненты t_2 -моды, рассчитанные в режиме кнудсеновского течения фононного газа, для нанопроводов калия с квадратным сечением $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см и длиной L = 50D в случаях, когда градиент температуры вращается (a) в плоскости грани куба, (б) в диагональной плоскости. Штриховая кривая 4с - полная термоэдс с учетом объемных механизмов релаксации для образца K5 с ε 0.053.

длина свободного пробега фононов полностью определяет анизотропию решеточной теплопроводности. В выражении для теплопроводности $\kappa(T)$ выделим теплоемкость единицы объема C_V , среднюю скорость фононов \overline{S} и среднюю длину свободного пробега фононов Λ_{ph} (см. подробнее [38, 46]):

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda} \frac{k_B}{(2\pi)^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{z^2} d\lambda \, dZ_q^{\lambda} \frac{(Z_q^{\lambda})^4}{\left(sh(Z_q^{\lambda}/2)\right)^2} \int_{-1}^{1} dx_{\theta} \int_0^{2\pi} d\varphi \, \frac{\left(V_{g_3}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^2}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^3 v_{ph}^{\lambda}(\theta,\varphi)} = \frac{1}{3} C_V \, \overline{S} \, \Lambda_{ph},$$

$$C_V = \frac{2\pi^2 k_B^4}{5\hbar^3} T^3 \frac{1}{3} \sum_{\lambda} \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3} \right\rangle, \qquad \overline{S} = \sum_{\lambda} \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2} \right\rangle \left\{ \sum_{\lambda} \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3} \right\rangle \right\}^{-1}, \qquad \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3} \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_q \left(S^{\lambda}\right)^{-3}.$$
(5.6)

Поскольку теплоемкость C_V и средняя скорость фононов \overline{S} не зависят от направления потока тепла, то анизотропия теплопроводности и вкладов в неё определяются длинами свободного пробега (см. [38, 46]):

$$\Lambda^{\lambda} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2}\right\rangle} \int_{-1}^{1} dx \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, \frac{\left(V_{g_{3}}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2}}{V_{B}^{\lambda}(\theta,\varphi)(S^{\lambda}(\theta,\varphi))^{3}}, \quad \tilde{\Lambda}^{\lambda} = \Lambda^{\lambda} / D.$$
(5.6a)

Обе величины Λ_{ph}^{λ} и α_{drag}^{λ} достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов, соответственно. Для медленной квазипоперечной моды направления фокусировки фононов θ_{max} =0.58± $n\pi/2$, соответствуют направлениям групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях, а направлениях дефокусировки – [111] (см. рисунки 5.1 и 5.2). Для продольных фононов ситуация обратная: направлениями фокусировки и максимумов термоэдс и длин пробега являются [111], а направлениями дефокусировки и минимумов термоэдс – направления [001]. Это неудивительно: чем больше длина свободного пробега относительно рассеяния фононов на границах образца, тем больше вероятность электрона столкнуться с неравновесным фононом и получить дополнительный импульс от градиента температуры. Как видно из рисунка 5.2, преобладающий вклад в термоэдс увлечения нанопроводов вносят медленные квазипоперечные фононы: их вклады в симметричных направлениях [001], [011] и [111] составляют 78, 65 и 57%, соответственно. Это связано с аномально большим вкладом медленной t_2 -моды в решеточную теплоемкость *C*_V, которая в Дебаевском приближении в 21 раз больше, чем для продольных фононов (см. [50]):

 $C_V^{t_2}: C_V^{t_1}: C_V^L: C_V = 0.78: 0.184: 0.0366: 1.$

Сравним угловые зависимости длин пробега фононов в нанопроводах калия и рассчитанных в модели изотропной среды. В [38] показано, что длины пробега для фононов различных поляризаций в модели изотропной среды равны друг другу и средней длине пробега Λ_{iso} . Они не зависят от упругих модулей, а полностью определяются геометрическими

параметрами образцов. Расчеты показали, что в направлениях фокусировки длины пробега в упруго анизотропных наноструктурах значительно превышали Λ_{iso} , тогда как в направлениях дефокусировки они оказывались меньше Λ_{iso} . Как видно из рисунка 5.1, в плоскости {100} для продольных фононов почти для всех направлений, за исключением узких интервалов в окрестности направлений [110], $\Lambda_{(100)}^{L} < \Lambda_{iso}$. Поэтому для них преобладает эффект дефокусировки. Для медленной и быстрой поперечных мод $\Lambda_{(100)}^{I} > \Lambda_{iso}$, поэтому для них преобладает эффект фокусировки. Причем для медленной t_2 -моды эффект фокусировки польеми в направлениях, близких к [110], а для быстрой t_1 -моды в направлениях, близких к [100]. В плоскости {110} для медленной t_2 -моды $\Lambda_{i100}^{I} > \Lambda_{iso}$, эффект фокусировки в нанопроводах калия проявляется для всех направлений, близких к [100]. В этой плоскости для L-фононов эффект фокусировки для направлениях близких к [100]. В этой плоскости для L-фононов эффект фокусировки для направлениях близких к [111], а в направлениях [100] для них преобладает эффект дефокусировки. Отметим, что для L-фононов в направлениях [111] длина пробега $\Lambda_{i100}^{L(111)}$ не только значительно больше Λ_{iso} , но и значительно превышает длину пробега медленной t_2 -моды (см. рисунок 5.1).

Анизотропия вкладов в термоэдс увлечения медленной *t*₂-моды и продольных фононов достаточно велики:

$$\alpha_{\theta_{\max}}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[100]}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[110]}^{t_2\{110\}} : \alpha_{[111]}^{t_2\{110\}} = 2 : 1.5 : 1.4 : 1,$$

$$\alpha_{[111]}^{L\{110\}} : \alpha_{[110]}^{L\{100\}} : \alpha_{[100]}^{L\{100\}} = 2.5 : 1.9 : 1.$$
(5.7)

Однако направления дефокусировки и минимумы вклада t_2 -моды соответствуют направлениям фокусировки и максимумам вклада продольных фононов. Они в значительной степени компенсируют друг друга, и анизотропия полной термоэдс значительно уменьшается: $\alpha_{\theta_{\max}}^{(100)} : \alpha_{1100}^{(110)} : \alpha_{1100}^{(100)} : \alpha_{1111}^{(110)} = 1.32$: 1.1:1.01:1. Заметим, что при измерении термоэдс в симметричных направлениях её анизотропия будет значительно меньше: $\alpha_{1100}^{(110)} : \alpha_{1000}^{(100)} : \alpha_{1111}^{(100)} = 1.1:1.01$:1. Оценки показали, что вклад быстрой поперечной моды в термоэдс увлечения в режиме кнудсеновского течения фононного газа мал из-за малости продольной компоненты этой моды, и им можно пренебречь. Так, например, для продольных фононов длины свободного пробега достигают максимумов в направлениях фокусировки – т.е. в [111], а минимумов – в направлениях дефокусировки – [001] (см. рисунки 5.1 и 5.2). Длины свободного пробега *L*-фононов, а также их вклады в термоэдс увлечения являются сильно анизотропными:

 $\Lambda_{[111]}^{L\{110\}}:\Lambda_{[110]}^{L\{110\}}:\Lambda_{\theta\max}^{L\{110\}}:\Lambda_{[100]}^{L\{110\}}=2.8:2:1.4:1, \qquad \alpha_{[111]}^{L\{110\}}:\alpha_{[110]}^{L\{100\}}:\alpha_{[100]}^{L\{100\}}=2.3:1.4:1.$

Следует отметить, что сдвиговая компонента t_2 -моды играет значительную роль в термоэдс увлечения, и её вклад по порядку величины совпадает с вкладом продольных фононов (см. рисунок 5.2). Сдвиговые волны оказывают значительное влияние на соотношение вкладов t_2 -моды и продольных фононов, а также на анизотропию термоэдс увлечения. В направлениях фокусировки продольных фононов [111] вклад t_2 -моды $\alpha_{1111}^{t_2(110)}$ без учета сдвиговой компоненты оказался на 32% меньше, чем вклад $\alpha_{1111}^{L(110)}$. Однако при учете сдвиговой компоненты t_2 -моды вклад $\alpha_{1111}^{t_2(110)}$ стал на 12% больше, чем вклад $\alpha_{1111}^{L(110)}$. Для нанопроводов с $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см граничное рассеяние вносит доминирующий вклад в релаксацию фононов. Роль объёмных механизмов мала: они обеспечивают уменьшение термоэдс увлечения от 1.5 до 5% для нанопроводов калия с ε =0, и от 2 до 7% для нанопроводов на основе K5 с ε =0.053 (см. рисунок 5.2, кривые 4 и 4с). Здесь и далее мы используем классификацию образцов K4, K5 и различных деформаций ε , приложенных к образцам, принятую в работе [158].

5.2 Анизотропии термоэдс увлечения нанопроводов в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов

Рассмотрим изменение анизотропии термоэдс увлечения нанопроводов в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов. С увеличением поперечного сечения скорость релаксации фононов на границах ослабляется, а роль объёмных механизмов возрастает. В результате анизотропия вкладов продольной и квазипоперечных мод в термоэдс увлечения монотонно уменьшается (см. рисунок 5.3). Из рисунка 5.3 видно, что кривые 4 и 4а, соответствующие зависимостям максимальных и минимальных величин термоэдс увлечения для кристалла калия без дислокаций от толщины D, при D>0.1·10⁻² см выхолят на насыщение и сливаются в одну линию. В этом пределе доминируют объёмные механизмы релаксации, и значения термоэдс слабо зависят от геометрических параметров образцов. Поэтому рассчитанные значения термоэдс увлечения для образцов с квадратным сечением D =0.1 см совпадают с экспериментальными данными [158] для пластин с прямоугольным сечением $D \times W = 0.15 \times 0.5$ см², но они различны для образцов с различной концентрацией дислокаций. Как видно из рисунка 5.3, во всем исследованном интервале D вклад сдвиговой компоненты значительно превышает вклад быстрой поперечной моды. При $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см он в 2 раза меньше вклада α^L_{drag} , а при $D > 2 \cdot 10^{-4}$ см становится больше максимального значения вклада α^L_{drag} (см. рисунок 5.3, кривая 3). При переходе к объёмным образцам (*D*≥10⁻¹ см) вклад сдвиговой



Рисунок 5.3 – Зависимости максимальных значений полной термоэдс увлечения для стержней калия с различной концентрацией дислокаций от толщины: кривая 4 - ε =0, кривая 5 - ε ≈0.053 (К5) и кривая 6 - ε ≈0.1 (К4). Для нанопроводов калия без дислокаций кривая 4a дает зависимость минимальных значений полной термоэдс увлечения $\alpha_{drag}^{[111]}$; кривые (3, 3a), (2, 2a) и (1, 1a) – зависимости максимальных и минимальных значений вкладов продольных α_{drag}^{L} , медленных α_{drag}^{t2} и быстрых α_{drag}^{t1} квазипоперечных фононов, соответственно; кривая 2b - вклад сдвиговых волн. Символы –экспериментальные данные [158].

компоненты превышает вклад продольных фононов α_{drag}^{L} в 9.6 раз. При малых значениях поперечного сечения $D \le 10^{-4}$ см доминирует граничное рассеяния, и кривые для образцов с различными концентрациями дислокаций и выбранного направления теплового потока сливаются в одну (см. рисунок 5.3 кривые 4, 5, 6). Для значений $D \ge 10^{-3}$ кривые для образцов с различными концентрациями дислокаций расходятся и при $D \ge 10^{-1}$ см выходят на насыщение, соответствующее значениям для объёмных образцов. Следует отметить, что с увеличением поперечного сечения нанопроводов максимальная анизотропия термоэдс увлечения, пропорциональная отношению $\alpha_{drag}(\theta_{max})/\alpha_{drag}^{[111]}$, изменяется немонотонным образом (см. рисунок 5.4). При переходе от режима кнудсеновского течения фононного газа ($D < 10^{-5}$ см) к режиму объёмных механизмов релаксации ($D \ge 10^{-1}$ см) она сначала возрастает от 32% при $D = 10^{-6}$ см, достигая максимума 36% при $D = 3 \cdot 10^{-5}$ см, затем уменьшается, а при $D \ge 10^{-1}$ см исчезает (см. рисунок 5.4). Этот эффект обусловлен тем, что продольные фононы значительно сильнее

рассеиваются на электронах, чем медленные поперечные, и их относительный вклад уменьшается и становится изотропным значительно быстрее, чем вклад $\alpha_{drag}^{t_2}$. В результате анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. При этом чем меньше концентрация дислокаций, тем больше максимальная анизотропия (см. рисунок 5.4). Такие



Рисунок 5.4 – Зависимости отношения термоэдс $\alpha_{drag}(\theta_{max})/\alpha_{drag}^{[111]}$ для направлений θ_{max} и [111] от толщины образцов с квадратным сечением *L* =50*D*, рассчитанные для кристаллов калия: ε =0 (кривая 1), К5 ε ≈0.053 (кривая 2), К4 с ε ≈0.1 (кривая 3).

значения анизотропии термоэдс вполне доступны экспериментальному определению. Из рисунка 5.4 видно, что анизотропия термоэдс 30% достигается не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа $D < 10^{-5}$ см, но и при толщине образцов, на два порядка больших: $D \approx (0.4$ -2)·10⁻³ см. Отметим, что эта особенность анизотропии термоэдс существенно упрощает проблему экспериментальной проверки рассчитанных в настоящей работе эффектов. Этот результат открывает новые перспективы для экспериментальных исследований электрон-фононного увлечения в металлах. На рисунке 5.5 мы представили результаты расчёта угловых зависимостей термоэдс образцов калия толщиной $D=3\cdot10^{-5}$ см, чтобы проиллюстрировать эффект деградации фокусировки для фононов различных поляризаций в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации. Как видно из рисунка 5.5, при вращении градиента температуры, как в плоскости грани куба, так и в диагональной плоскости доминирует вклад медленной t_2 -моды $\alpha_{drag}^{t_2}$, который определяет анизотропию термоэдс. Вклад *L*-фононов изотропизируется, а его относительная величина уменьшается: в направлении [001] он становится меньше вклада медленной t2-моды в 4.8 раза. В направлениях фокусировки продольных фононов [111] ситуация качественно изменяется: вклад α^L_{drag} при $D=3\cdot 10^{-5}$ см становится в 1.9 раза меньше, чем $\alpha_{drag}^{t_2}$, тогда как в режиме кнудсеновского течения фононного газа наоборот – в 1.5 раза больше вклада медленной *t*₂-моды (см. рисунок 5.2 и 5.5).

Итак, проведенный анализ показал, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения нанопроводов калия. По порядку величины он совпадает с вкладом продольных фононов, а для некоторых направлений превосходит его. Вклад *t*₂-моды при учете только продольной компоненты в направлениях [111] оказался на 32% меньше, а при учете



Рисунок 5.5 – Угловые зависимости термоэдс α_{drag} (нВ/К) (кривые 4), а также вкладов продольных α_{drag}^{L} (кривые 3), медленной t_2 -моды $\alpha_{drag}^{t_2}$ (кривые 2) и $\alpha_{drag}^{t_1}$ (кривые 1), рассчитанные при учете граничного и объёмных механизмов релаксации фононов для образцов калия с квадратным сечением $D = 3 \cdot 10^{-5}$ см и длиной L = 50D в случаях, когда градиент температуры вращается (а) в плоскости грани куба, (б) в диагональной плоскости.

сдвиговой компоненты *t*₂-моды – на 12% больше, чем вклад *L*-фононов. Определены направления, соответствующие максимальным и минимальным значениям термоэдс увлечения нанопроводов. Установлено, что вклады колебательных мод в термоэдс достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов. Показано, что в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов с увеличением поперечного сечения нанопроводов анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. При этом значения анизотропии термоэдс, достаточные для экспериментальной проверки, достигаются не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа, но и при толщине образцов на два порядка больших.

5.3 Термоэдс увлечения в монокристаллических нанопластинах калия при низких температурах

Рассмотрим влияние фокусировки фононов и сдвиговых волн на анизотропию термоэдс увлечения в нанопластинах калия и проанализируем новый эффект, обусловленный

конкуренцией граничного и объёмных механизмов релаксации фононов, на основе результатов работы [55]. Покажем, что в двух одинаковых нанопластинах прямоугольного сечения для направления градиента температуры [011] фокусировка фононов приводит к зависимости термоэдс от ориентации широких граней. Для ориентации широких граней {001} термоэдс увлечения оказалась больше, чем для ориентации {011}. Ориентационная анизотропия в значительной степени обусловлена конкуренцией вкладов медленной t_2 -моды и *L*-фононов. В режиме граничного рассеяния из-за компенсации вкладов этих мод ориентационная анизотропия термоэдс увлечения в нанопластинах толщиной $D=5\cdot10^{-6}$ см и шириной $W=\mu D$ (при $\mu=3.3$) имеет минимальное значение 14%. При увеличении поперечных параметров нанопластии она изменяется немонотонным образом и благодаря уменьшению компенсации вкладов квазипоперечной моды и продольных фононов в максимуме может достигать 37%. Это делает эффект вполне доступным для экспериментальных исследований.

Проанализируем влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения нанопластин калия. Определим её зависимости от толщины D в интервале от 50 нм до 1 см для различных кристаллографических направлений. Мы зафиксировали температуру 2 К, ширину $W=\mu$ ·D и длину L, где μ = 3.3, $k_0=L/2D=12.15$, L = 2D· $k_0=24.3D$. Такой выбор параметров обусловлен тем, что при D = 0.15 см можно сравнить результаты расчетов термоэдс с экспериментальными данными [158]. Скорости релаксации фононов на границах нанопластин $D \times \mu \cdot D$ являются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами μ и k₀ [38, 53, 56]. Они описываются формулами (2.16) и (2.17) для образцов с прямоугольным сечением (см. также приложение А). Из этих формул следует, что с уменьшением D скорости релаксации фононов на границах возрастают. Поэтому для реализации кнудсеновского течения фононного газа в кристаллах калия необходимо уменьшить поперечные размеры нанопластин до $D < 10^{-5}$ см, чтобы диффузное рассеяние фононов на границах было более эффективно, чем объёмные механизмы релаксации. В этом пределе термоэдс увлечения нанопластин определяется выражением (5.2). Она является анизотропной и следует зависимости $\alpha_{drag} \approx B_2 T^4$ [47, 48]. Однако при доминирующей роли объёмных механизмов релаксации фононов на электронах и дислокациях термоэдс увлечения в объёмных пластинах калии изотропна и следует асимптотике: *α*_{drag}(*T*)≈*AT*³ [47, 48, 158, 159]. Рассмотрим угловые зависимости термоэдс увлечения и длин свободного пробега фононов различной поляризации для кристаллов калия при вращении градиента температуры в плоскостях {100} и {110}. Из рисунка 5.6 видно, что длины свободного пробега фононов разной поляризации имеют одинаковый порядок величины. Отметим, что для градиента температуры в плоскости {110} длина свободного пробега продольных фононов в

направлениях фокусировки [111] заметно больше, чем для других колебательных мод. Сравнение угловых зависимостей термоэдс увлечения и длин свободного пробега для *L* и *t*₂ мод показал, что их зависимости качественно согласуются (см. рисунок 5.6 и 5.7). Обе величины достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки



Рисунок 5.6 – Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} / D$ в режиме граничного рассеяния для нанопластин калия с прямоугольным сечением при $D=5\cdot10^{-6}$ см, $\mu = 3.33$, $k_0=12.67$ в случаях, когда градиент температуры вращается (а) в плоскости грани куба, (б) в диагональной плоскости. Кривые 1 и 2 для быстрой и медленной поперечных мод, кривая 3 для продольной моды, кривая 4 – средняя длина свободного пробега, 5 – для модели изотропной среды.



Рисунок 5.7 – Угловые зависимости термоэдс α_{drag} (нВ/К) (кривые 4), вкладов продольных α_{drag}^{L} (кривые 3), квазипоперечных фононов $\alpha_{drag}^{t_2}$ (кривые 2) и $\alpha_{drag}^{t_1}$ (кривые 1), а также вкладов от продольной (кривые 2а) и сдвиговой (кривые 2b) компоненты t_2 -моды, рассчитанные для нанопластин калия K5 с $\varepsilon \approx 0.053$ и прямоугольным сечением при $D=5\cdot 10^{-6}$ см, $\mu=3.33$ и $k_0=12.67$ в случаях, когда градиент температуры вращается (а) в плоскости грани куба, (б) в диагональной плоскости. Штриховая кривая 4с - полная термоэдс в режиме кнудсеновского течения фононного газа.

172 фононов, соответственно. Для медленной t_2 -моды направления фокусировки $\theta_{max}=0.58\pm n\pi/2$ в

плоскостях {100}, соответствуют направлениям векторов групповой скорости в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях, а направления дефокусировки [111]. Для продольных фононов – ситуация обратная: максимумы термоэдс и направления фокусировки – [111], а минимумы – в направлениях дефокусировки – [001] (см. рисунок 5.6 и 5.7). Представляет интерес сравнить угловые зависимости длин пробега фононов в нанопластинах калия и рассчитанные в модели изотропной среды. В работе [38] показано, что длины пробега для фононов различных поляризаций в модели изотропной среды равны друг другу и средней длине пробега Λ_{iso} . Они не зависят от упругих модулей, а полностью определяются геометрическими параметрами образцов. Расчеты показали, что в направлениях фокусировки длины пробега в упруго анизотропных наноструктурах значительно превышают Λ_{iso} , тогда как в направлениях дефокусировки они меньше Λ_{iso} . Как видно из рисунка 5.6, в плоскости {100} для продольных фононов во всех направлениях $\Lambda_{(100)}^L < \Lambda_{iso}$, поэтому для них преобладает эффект дефокусировки. Для медленной и быстрой поперечных мод во всех направлениях $\Lambda_{(100)}^t > \Lambda_{iso}$, поэтому для них преобладает эффект фокусировки. Поскольку $\Lambda_{\{100\}}^{t_2} \ge \Lambda_{\{100\}}^{t_1}$, то эффект фокусировки для медленной t_2 -моды проявляется в большей степени, чем для быстрой t_1 -моды. В плоскости {110} для медленной t_2 -моды $\Lambda_{\{100\}}^{t_2} > \Lambda_{iso}$, эффект фокусировки в нанопластинах калия проявляется для всех направлений. Для *L*-фононов в плоскости {110} и направлениях, близких к [111] и [110], преобладает эффект фокусировки, поэтому $\Lambda^L_{(110)} >> \Lambda_{iso}$. В окрестности направлений [100] (при углах в интервале $\pm(\pi/6)$) для них преобладает эффект дефокусировки. Отметим, что для *L*фононов в направлениях [111] длина пробега $\Lambda^{L[111]}_{\{110\}}$ не только значительно больше Λ_{iso} , но и существенно превышает длину пробега медленной t2-моды (см. рисунок 5.6). Совпадение направлений максимумов и минимумов длин свободного пробега фононов и термоэдс увлечения не является удивительным, так как чем больше длина свободного пробега относительно рассеяния фононов на границах образца, тем больше вероятность столкновения электрона с неравновесным фононом для того, чтобы получить дополнительный импульс от градиента температуры. Так, например, их отношения для симметричных направлений в режиме кнудсеновского течения фононного газа калия К5 с ≈0.053 имеют вид:

$$\alpha_{\{110\}}^{L[11]}:\alpha_{\{100\}}^{L[100]}:\alpha_{\{100\}}^{L[100]}=2.01:1.28:1, \qquad \Lambda_{\{110\}}^{L[111]}:\Lambda_{\{100\}}^{L[100]}:\Lambda_{\{100\}}^{L[100]}=2.63:1.43:1.$$

$$\alpha_{drag\{100\}}^{t_{2}[100]}:\alpha_{drag\{100\}}^{t_{2}[110]}=1.61:1.58:1, \qquad \Lambda_{\{100\}}^{t_{2}[110]}:\Lambda_{\{100\}}^{t_{2}[100]}:\Lambda_{\{110\}}^{t_{2}[111]}=1.58:1.23:1.$$
(5.10)

Вклад быстрой поперечной моды в термоэдс мал из-за малости продольной компоненты (см. рисунок 5.7, кривые 1). Поэтому анизотропия термоэдс обусловлена главным образом конкуренцией вкладов $\alpha_{drag}^{t_2}$ и α_{drag}^L . Поскольку минимум вклада t_2 -моды и максимум вклада продольных фононов α_{drag}^L для нанопластин в режиме граничного рассеяния достигаются в направлениях, близких к [111], то они в значительной мере компенсируют друг друга. Поэтому анизотропия полной термоэдс существенно уменьшается и становится гораздо меньше анизотропии вкладов. В режиме граничного рассеяния имеем:

$$\alpha_{drag}(\theta_{mx}):\alpha_{drag[100]}^{[110]}:\alpha_{drag[100]}^{[100]}:\alpha_{drag[100]}^{[110]}:\alpha_{drag[110]}^{[100]}:\alpha_{drag[110]}^{[111]}=1.19:1.16:1.08:1.04:1.04:1,$$

$$\alpha_{drag}^{t_2}(\theta_{mx}):\alpha_{drag[100]}^{t_2[100]}:\alpha_{drag[100]}^{t_2[100]}:\alpha_{drag[110]}^{t_2[100]}:\alpha_{drag[110]}^{t_2[110]}:\alpha_{drag[110]}^{t_2[111]}=1.71:1.61:1.58:1.48:1.06:1,$$

$$\alpha_{\{110\}}^{L[110]}:\alpha_{drag[110]}^{L[110]}:\alpha_{\{100\}}^{L[110]}:\alpha_{\{100\}}^{L[100]}=2.29:2.26:1.37:1.$$
(5.11)

Преобладающий вклад в термоэдс увлечения нанопластин вносит медленная t₂-мода, которая в значительной степени определяет угловые зависимости полной термоэдс увлечения (см. рисунок 5.7). Её вклады в симметричных направлениях [001], [011] и [111] составляют 78, 65 и 57%, соответственно. Это связано с аномально большим вкладом t_2 -моды в решеточную теплоемкость, которая в Дебаевском приближении в 21 раз больше, чем для продольных фононов: $C_V^{t_2}: C_V^{t_1}: C_V^L: C_V = 0.78: 0.184: 0.0366: 1.$ Вклад $lpha_{drag\{100\}}^{t2[100]}$ в направлении [100] в 5 раз превышает вклад *L*-фононов, а в направлении [111] – всего на 23% больше. Анализ влияния сдвиговых волн на термоэдс увлечения в нанопластинах калия показал, что сдвиговые волны играют значительную роль в электрон-фононном увлечении. Так, например, для градиента температур в плоскости {100} вклад сдвиговой компоненты t2-моды в термоэдс увлечения превышает вклад продольных фононов в 1.2–1.5 раза (см. рисунок 5.7а). Для градиента температур в плоскости {110} вклад сдвиговой компоненты t2-моды в термоэдс увлечения сравним по величине с вкладом продольных фононов. Для направлений [001] он в 1.3 больше, а для направлений [111] и [110], близких к направлениям фокусировки L-фононов он в 1.6 раза меньше вклада *L*-фононов. В направлениях фокусировки *L*-фононов [111] вклад продольной компоненты *t*₂-моды в термоэдс на 24% меньше, при этом полный вклад *t*₂-моды на 23% больше, чем вклад продольных фононов $\alpha_{[111]}^{L\{110\}}$ (см. рисунок 5.76).

Следует отметить, что режим кнудсеновского течения фононного газа в металлах (см. рисунок 5.7. кривые 4с), в отличие от диэлектриков, не может быть полностью реализован, поскольку кроме граничного рассеяния всегда имеет место рассеяние фононов на электронах. Оценки показывают, что при $D=5\cdot10^{-6}$ см роль объёмных механизмов мала. Уменьшение

термоэдс увлечения при их учете составляет от 1.5 до 5% для нанопластин калия с *ε*=0, и от 2 до 7% для нанопластин на основе К5 с деформацией *ε*≈0.053.

5.4 Анизотропия термоэдс увлечения нанопластин в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации

Проанализируем изменение анизотропии термоэдс увлечения пластин калия в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов. С увеличением поперечного сечения образца скорость релаксации фононов на границах ослабляется, а роль объёмных механизмов возрастает. В результате анизотропия вкладов продольной и квазипоперечных мод в термоэдс увлечения монотонно уменьшаются (см. рисунок 5.8). Из рисунка видно, что кривая 4 соответствует зависимости максимальной величины термоэдс увлечения для образца К4 с ε от толщины. При $D \ge 10^{-3}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации, и значения термоэдс слабо зависят от геометрических параметров образцов. Поэтому для образцов с различной концентрацией дислокаций рассчитанные значения термоэдс увлечения совпадают с экспериментальными данными [158] для образцов прямоугольного



Рисунок 5.8 – Зависимости полной термоэдс α_{drag} (мкВ/К) (кривые 4, 5, 6), а также вкладов в термоэдс увлечения от быстрых $\alpha_{drag}^{t_1}$ (кривые 1, 1a, 1b), медленных квазипоперечных $\alpha_{drag}^{t_2}$ (кривые 2, 2a, 2b) и продольных фононов α_{drag}^{L} (кривые 3) от толщины *D* для пластин с μ =3.3 и k_0 =12.15 для направления градиента температуры под углом θ_{max} в плоскости {100}, рассчитанных для кристаллов: К4 с ε =0.1 - кривые 1b, 2b, 4b, K5 с ε =0.053 - кривые 1a, 2a, 3a, 4a, без дислокаций - кривые 1, 2, 2c, 2d, 3, 4, кривая 2c - вклад продольной компоненты, кривая 2d - вклад сдвиговых компоненты медленной t_2 -моды. Символы – данные [158].

сечения $D \times W=0.15 \times 0.5 \text{ см}^2$. Как видно из рисунка 5.8, во всем исследованном интервале толщин D вклад сдвиговой компоненты значительно превышает вклад быстрой поперечной моды. При $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см вклад сдвиговой компоненты на 30% больше минимального значения вклада продольных фононов α_{drag}^L (см. рисунок 5.8а), а при $D > 8 \cdot 10^{-5}$ см он становится больше максимального значения вклада α_{drag}^L (см. рисунок 5.8, кривая 3). При переходе к объёмным образцам ($D \ge 10^{-1}$ см) вклад сдвиговой компоненты для образца K4 с $\varepsilon \approx 0$ превышает вклад продольных фононов α_{drag}^L в 9.6 раза. В области малых значений поперечного сечения $D \le 10^{-4}$ см доминирует граничное рассеяние, и кривые, соответствующие различным концентрациях дислокаций, для каждого направления теплового потока сливаются в одну (см. рисунок 5.8, кривые 4, 5, 6). Для больших значений толщины $D \ge 10^{-3}$ см кривые, соответствующие образцам с различными концентрациями дислокаций, расходятся и при $D \ge 10^{-1}$ см выходят на насыщение, соответствующее значениям для объёмных образцов (см. рисунок 5.8).

Следует отметить, что анизотропия термоэдс увлечения в нанопластинах, как и в нанопроводах, обусловлена конкуренцией вкладов t2-моды и L-фононов. Для её характеристики введем параметр $\delta_{[111]}^{\theta_{\text{max}}}(\mu, D) = \alpha_{drag}(\theta_{\text{max}}) / \alpha_{drag[110]}^{[111]}$. Согласно выражению (5.9), в режиме граничного рассеяния для вкладов t_2 -моды и L-фононов имеем: $\delta_{1111}^{\theta_{\max}t_2}(\mu, D) = 1.71$, $\delta_{[111]}^{\theta_{\max}L}(\mu, D) = 0.54$. В результате компенсации этих вкладов максимальная анизотропия полной термоэдс ($\delta_{1111}^{\theta_{\text{max}}}(\mu, D)$ -1) при $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см и μ =3.3 уменьшается до 19%. Очевидно, что учет электрон-фононной релаксации приводит к уменьшению вклада *L*-фононов и к увеличению анизотропии полной термоэдс: для нанопластины K5 с $\varepsilon = 0$ $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см и $\mu = 3.3$ она возрастает до 23%. С увеличением толщины пластин скорость релаксации фононов на границах ослабляется, а роль объёмных механизмов возрастает. В результате анизотропия вкладов всех колебательных мод в термоэдс монотонно уменьшается. Однако скорость релаксации продольных фононов на электронах в 25 раз больше, чем для t2-моды (см. таблицу 4.1). Поэтому с увеличением толщины образца относительный вклад L-фононов уменьшается и становится изотропным значительно быстрее, чем вклад t_2 -моды. В связи с этим минимум термоэдс $\alpha_{drag[110]}^{[111]}$, в который значительный вклад вносят L-фононов, убывает быстрее, чем максимум термоэдс $\alpha_{drag}(\theta_{max})$, определяемый главным образом вкладом t2-моды. При увеличении толщины нанопластин взаимная компенсация этих вкладов нарушается, и анизотропия полной термоэдс изменяется немонотонным образом. Для пластин K5 с $\varepsilon=0$ она сначала возрастает от 23% при $D=5\cdot10^{-6}$ см, лостигает максимума 29% при $D=3\cdot10^{-5}$ см. затем уменьшается и при $D\ge10^{-1}$ см исчезает (см.

рисунок 5.9а). Увеличение концентрации дислокаций приводит к уменьшению анизотропии термоэдс увлечения (см. рисунок 5.8, кривые 1a, 2a, 3a).

Анализ анизотропии термоэдс увлечения показал, что для нанопластин калия имеет место довольно любопытный эффект. В двух одинаковых нанопластинах прямоугольного сечения термоэдс в направлении градиента температуры [011] будет зависеть от ориентации широких граней пластин. Для характеристики этого эффекта введем ориентационный параметр $\delta_{[110]}(\mu,D) = \alpha_{drag[100]}^{[110]} / \alpha_{drag[110]}^{[110]}$. Рассмотрим более подробно ориентационную анизотропию термоэдс увлечения ($\delta_{[110]}(\mu,D)$ -1) в монокристаллических пластинах калия. Физическими причинами нового эффекта в термоэдс увлечения при низких температурах является влияние упругой анизотропии на распространение фононов медленной t_2 -моды и *L*-фононов в нанопластинах казия, а также конкуренцией вкладов t_2 -моды и *L*-фононов при увеличении поперечных размеров



Рисунок 5.9 – (а): Зависимости параметров $\delta_{[111]}^{\max}(\mu, D)$ (кривые 1а, 2а, 3а, 6а) и $\delta_{[110]}(\mu, D)$ (кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6) от толщины D для нанопластин калия с $k_0=12.67$: К5 с $\varepsilon=0$ (кривые 1, 1а, 6а, 6), с $\varepsilon\approx0.053$ (кривые 2, 2а, 5), К4 с $\varepsilon\approx0.1$ (кривые 3, 3а, 4). Кривые 1, 1а, 2, 2а, 3, 3а для пленок с параметром $\mu=3.3$, кривые 4, 5, 6, 6а для пленок с параметром $\mu=10$. (б): Зависимости величин $\delta_{[110]}(\mu, D)$ для пластин с $D=8\cdot10^{-5}$ см (кривые 1, 2) и $\delta_{[111]}^{\max}(\mu, D)$ (кривые 1а, 2а) для нанопластин с $D=5\cdot10^{-5}$ см от параметра μ в кристаллах К5 с $\varepsilon=0$ (кривые 1, 1а) и К4 с $\varepsilon\approx0.1$ (кривые 2, 2а) при $k_0=12.67$.

нанопластин. В работах Фукса, Зондгеймера и Зайлина с соавторами [32, 105, 120] показано, что при достаточно низких температурах теплосопротивление пленок определяется главным образом диффузным рассеянием фононов на плоскостях пленок. А основной вклад в теплопроводность при диффузном рассеянии фононов на границах вносят фононы, распространяющиеся почти параллельно плоскости пленок. Из рисунка 5.7 видно, что преобладающий вклад в термоэдс увлечения вносит медленная *t*₂-мода, которая в значительной мере определяет угловые

177 моэдс. Из рисун

зависимости и анизотропию полной термоэдс. Из рисунков 4.18 главы 4 для угловых зависимостей коэффициентов усиления потока фононов и длин свободного пробега в нанопластинах калия видно, что эффект фокусировки медленной *t*₂-моды для волновых векторов в плоскости {001} проявляется в большей степени, чем в плоскости {011}. Поэтому для градиента температуры в плоскости {001} фононы могут передать электронам значительно больший импульс, чем для градиента температуры в плоскости {011} и обеспечить более высокие значения термоэдс увлечения. Как уже отмечали, анизотропия вкладов t2-моды и Lфононов в термоэдс увлечения велика: в режиме граничного рассеяния для нанопластин К5 с $D=5\cdot10^{-6}$ см, $\varepsilon=0, \mu=3.3$ для моды t_2 отношение $\delta_{[110]}^{t_2}(\mu,D)=1.52$, тогда как для *L*-фононов имеем $\delta_{[110]}^L(\mu, D) = 0.6$. При этом ориентационная анизотропия для t_2 -моды составляет 52%. Однако благодаря компенсации вкладов ориентационная анизотропия в этих нанопластинах уменьшается до 14%. С увеличением толщины нанопластин взаимная компенсация этих вкладов нарушается благодаря более сильному рассеянию L- фононов на электронах и возрастанию роли t2-моды. В результате ориентационная анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Она возрастает от 14% при $\varepsilon = 0$, $D=5\cdot 10^{-6}$ см и $\mu=3.3$, достигает максимума 22% при $D=8\cdot10^{-5}$ см, затем уменьшается и при $D\ge10^{-1}$ см исчезает (см. рисунок 5.9а). Как видно из рисунка 5.9а, кривые 1, 2 и 3, увеличение концентрации дислокаций приводит к уменьшению анизотропии термоэдс увлечения. Ориентационный эффект представляет научный интерес, но его величина при µ=3.3 относительно невелика. Однако с увеличением ширины пластины (параметра µ) при фиксированной толщине величина ориентационного параметра $\delta_{[110]}(\mu, D)$ возрастает, и при $\mu \ge \mu^{\bullet}$ он становится больше, чем $\delta_{[111]}^{\max}(\mu, D)$ (см. рисунок 5.96). Связано это с тем, что для градиента температуры в плоскости {011} термоэдс увлечения при $D=8\cdot10^{-5}$ см становится более изотропной, а её угловые зависимости при увеличении ширины пленки (параметра µ) становятся эллипсоидальными с минимальными значениями вдоль направлений [011] (см. рисунок 5.10). Минимум термоэдс увлечения переходит из направления [111] для μ = 3.3 в направление [011] при $\mu \ge \mu^{\bullet} \approx 5$ (см. рисунки 5.7 и 5.8). В итоге для нанопластин калия K5 с ε = 0 при D=8·10⁻⁵ см, k_0 =12.67 и μ =10 ориентационная анизотропия возрастает до 37%. Для образцов калия K4 с максимальной концентрацией дислокаций *ε*≈0.1 при *μ*=10 ориентационная анизотропия уменьшается до 35%. Таким образом, новый эффект вполне доступен для экспериментальных исследований. В отличие от второго эффекта МакКарди в решеточной теплопроводности кремниевых пластинах (см. [15, 38]), в пластинах калия зависимость термоэдс увлечения для направления градиента температуры [011] от ориентации широких граней обусловлена конкуренцией вкладов медленной t2-моды и L-фононов. Этот



Рисунок 5.10 – Угловые зависимости термоэдс α_{drag} (нВ/К) (кривые 4), вкладов продольных α_{drag}^{L} (кривые 3), квазипоперечных фононов $\alpha_{drag}^{t_2}$ (кривые 2) и $\alpha_{drag}^{t_1}$ (кривые 1), рассчитанные для нанопластин калия К5 прямоугольного сечения и $\varepsilon = 0$ при $D = 8 \cdot 10^{-5}$ см, $\mu = 10$ и $k_0 = 12.67$ в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскостях: (a) {100} и (б) {011}.

эффект представляет несомненный интерес для исследования влияния электрон-фононного увлечения на кинетические эффекты в щелочных металлах.

Итак, в этом разделе показано, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения пластин. По порядку величины он совпадает с вкладом продольных фононов, а в некоторых направлениях превосходит его. Сдвиговые волны оказывают значительное влияние на соотношение вкладов t2-моды и L-фононов, а также на анизотропию термоэдс увлечения. Вклад t2-моды в термоэдс нанопластин при учете только продольной компоненты в направлениях [111] на 24% меньше, а при учете сдвиговой компоненты t2-моды - на 23% больше, чем вклад L-фононов. Отметим, что в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов анизотропия термоэдс увлечения в пластинках калия, как и в нанопроводах, обусловлена конкуренцией вкладов t2-моды и L-фононов. С увеличением толщины нанопластин благодаря более сильному рассеянию *L*-фононов на электронах анизотропия термоэдс увлечения изменяется немонотонным образом. Анализ показал, что при доминирующей роли граничного рассеяния для термоэдс увлечения имеет место новый эффект: для градиента температуры в направлении [011] она становится зависящей от ориентации широкой грани нанопластин. В результате компенсации вкладов L- и t2-моды анизотропия полной термоэдс увлечения при $D=5\cdot10^{-6}$ см, $\mu=3.33$ составляет 14%. С увеличением толщины нанопластины величина эффекта при μ =3.3 сначала возрастает, достигая максимума 22% при D=8·10⁻⁵ см, затем уменьшается, а

при $D \ge 10^{-1}$ см исчезает. Однако с увеличением ширины пластины до $\mu = 10$ при $D = 8 \cdot 10^{-5}$ см ориентационная анизотропия возрастает до 37%. Очевидно, что полученные результаты представляют несомненный научный интерес и стимулируют проведение новых экспериментальных исследований термоэдс увлечения в щелочных металлах.

5.5 Фокусировка фононов и термоэдс увлечения в квадратных пленках калия в условиях конкуренции граничного и объемных механизмов релаксации

Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в пленках калия с различной ориентацией плоскостей. Предполагается, что длина $L = 2k_0 \cdot D$ и ширина $W = \mu \cdot D$ пленок гораздо больше их толщины D, поэтому параметры $k_0 >>1$ и $\mu >>1$. Скорости релаксации фононов на границах наноплёнок определяются выражениями (2.16) и (2.17) для образцов с прямоугольным сечением (см. также приложение A). Проанализируем угловые зависимости термоэдс увлечения и длин пробега фононов для трех случаев, когда тепловой поток вращается в плоскостьх пленок: (1) плоскость пленки совпадает с плоскостью $\{J\} = \{100\}, (2)$ плоскость пленки совпадает с диагональной плоскостью $\{J\} = \{110\}, (3)$ плоскость пленки перпендикулярна диагонали куба $\{J\} = \{111\}$. В последнем случае угол ψ отсчитывается от направления $[11\overline{2}]$. Тогда компоненты групповой скорости фононов $V_{el}^{\lambda}(\theta, \varphi)$, $V_{el}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и $V_{el}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ могут быть представлены в виде (2.13)-(2.14), (3.2) [38, 42, 120].

Очевидно, что в рассматриваемом случае термоэдс увлечения, как и теплопроводность и длина пробега электронов в пленках, будет зависеть от двух ориентационных параметров: направления теплового потока $[I(\psi)]$ и ориентации плоскости пленки $\{J\}$. Термоэдс увлечения можно представить в виде:

$$\alpha_{drag[I(\psi)]}^{\{J\}} = \left(\frac{1}{4\pi}\right) \sum_{\lambda} \int d\Omega_q \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi), \qquad \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = 3\frac{k_B}{e} \int_{0}^{T_e^{\lambda}(\theta, \varphi)/T} \left(Z_q^{\lambda}\right)^4 th\left(Z_q^{\lambda}/2\right) dZ_q^{\lambda} \times \left(\frac{V_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{V_{ph}^{\lambda}(q)}\right) \left(\frac{T_{\delta}^{\lambda}}{T}\right) \times \left\{ \widetilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \right\}.$$
(5.15)

Рассмотрим угловые зависимости термоэдс увлечения и длин пробега фононов, рассчитанные при вращении градиента температуры в плоскостях пленок с ориентациями {100}, {110} и {111} (см. рисунок 5.11). При сравнении этих зависимостей обращают на себя внимание следующие особенности. Во-первых, термоэдс увлечения и средние длины пробега фононов в квадратных пленках (*L*=*W*) с ориентациями плоскостей {100} и {111} являются изотропными.



Рисунок 5.11 – Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов (а, б, в) и термоэдс увлечения (нВ/К) (г, д, е) в квадратных пленках калия с параметрами L = W = 100D и D = 50 нм и ориентациями плоскостей {100} (а, г), {110} (б, д) и {111} (в, е). Кривые 1 – для быстрой поперечной моды, 2 – для медленной поперечной моды, 3 – для продольной моды, 4 – для полной термоэдс увлечения и средней длины свободного пробега, 5 – длина свободного пробега в модели изотропной среды. Кривые 1-4, 2а и 2b для кристаллов К5 без дислокаций ($\varepsilon = 0$). Кривые 2а и 2b вклады продольной и сдвиговой компоненты моды t_2 в термоэдс увлечения, соответственно. Кривые 4a и 4b – расчет полной термоэдс увлечения для кристалла калия с дислокациями $\varepsilon = 0.1$ и в кнудсеновском режиме, соответственно.

Во-вторых, для пленок с ориентацией {110} они имеют эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления [100]. Проанализируем физические причины, которые приводят к

180
зависимости термоэдс увлечения и длины пробега от ориентации плоскостей пленок. Согласно теории Казимира-МакКарди [8, 15] все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца. В связи с этим в каждой точке поверхности независимо от её ориентации и параметров анизотропии фононы всех поляризаций рассеиваются одинаково. Поэтому, казалось бы, термоэдс и теплопроводность пленок не должны зависеть от ориентации плоскостей пленок. Далее мы покажем, что анизотропия термоэдс увлечения обусловлена влиянием упругой анизотропии на распространение акустических мод в квадратных пленках, имеющих различную ориентацию. Для этого проанализируем распределение электронного и фононного потоков по углам $\Phi(\theta, \varphi)$ в плоскостях пленок, имеющих различную ориентацию, а также их распределение по углам $\Theta(\theta,$ *ф*) в поперечных сечениях, включающих направление теплового потока. Перейдем в систему координат, связанную с пленкой. Ось Z направим перпендикулярно плоскости пленки, а угол Θ - в поперечном сечении, включающем направление теплового потока. В пленках, имеющих ориентацию {100}, угол $\Phi = \varphi$, $\Theta = \theta$. В новой системе координат распределение термоэлектрического тока увлечения и фононного потока в металлических пленках по углам Θ и Ф может быть определено аналогичным образам, как это сделано в [38, 41, 74] для потока фононов в диэлектрических нанопленках:

$$\alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\Phi \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi), \qquad \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Phi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d(\cos\Theta) \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi) .$$
(5.16)

Определим актуальный интервал углов, дающий основной вклад при усреднении длин пробега по углам Ф в плоскостях пленок с различными ориентациями. Для этого в формулах (5.16) проведем усреднение по поперечному сечению пленки и построим зависимости длин пробега $\Lambda_{(I(\psi))}^{\lambda(J)}(\Phi)$ и термоэдс увлечения $\alpha_{drag(I(\psi))}^{\lambda(J)}(\Phi)$ от угла Ф. Анализ показал, что для квадратных пленок калия с ориентациями {100} и {111} этот интервал углов составляет приближенно $\Delta \Phi \approx \pi/2$. Фокусировки фононов в кристаллах калия существенно отличается от полупроводниковых кристаллов из-за аномально больших величин параметра анизотропии *k*-1. В отличие от Si, где для волновых векторов в плоскости {100} *t*₂-мода фокусируется и дефокусируется в направлениях [100] и [110], соответственно. В пленках калия с плоскостью {100} *t*₂-мода фокусируется в направлениях, которые соответствуют векторам групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях при углах $\theta_{max}=0.58\pm n\pi/2$, а дефокусируется в направлениях [100] (см. [46] рисунки 1 и 2). Угол между этими направлениями составляет $\pi/6 < \Delta \phi < \pi/4$.

Для продольных фононов в направлениях [100] и [110] происходит дефокусировка и локальный максимум фокусировки, соответственно. Угол между этими направлениями

составляет $\Delta \varphi = \pi/4$. В пленках с плоскостью {111} угол между направлениями фокусировки [110] и дефокусировки [112] для t_2 -моды и продольных фононов составляет $\Delta \varphi = \pi/6$. Поэтому для произвольного направления потока тепла область усреднения $\Delta \Phi$ в плоскости квадратных пленок с ориентациями {100} и {111} захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому неудивительно, что после усреднения по углам Φ для квадратных пленок с ориентациями {100} и {111} длины пробега и термоэдс увлечения становятся изотропными (см. рисунок 5.11(а, в), (г, е)). Таким образом, анизотропия термоэдс увлечения и длин свободного пробега фононов в квадратных пленках с плоскостями {100} и {111} в режиме граничного рассеяния полностью определяется ориентацией плоскостей пленок.

Другая ситуация складывается для термоэдс увлечения и потока тепла в пленках с ориентацией {110}, где зависимости термоэдс увлечения и длин свободного пробега имеют эллипсоидальный вид с длинными осями вдоль направлений [100] для t_2 -моды и вдоль направлений [110] для продольных фононов. В пленках с ориентацией $J = {110} t_2$ -мода фокусируется и дефокусируется в направлениях [100] и [110] (см. рисунок 5.11 б,д). Для продольных фононов направления фокусировки и дефокусировки относительно t_2 -моды меняются местами. Угол между этими направлениями составляет $\Delta \Phi = 90^{\circ}$. Он оказывается слишком велик, чтобы при усреднении в плоскости пленки полностью размыть эффект фокусировки, в отличие от пленок с плоскостями {100} и {111}. Для произвольного направления не могут быть одновременно охвачены, и угловые зависимости длин пробега t_2 -моды и *L*-фононов остаются анизотропными. При этом для t_2 -моды длинная ось эллипсоида направлена вдоль [100], а для *L*-фононов – вдоль [110] (см. рисунок 5.11 б,д). Эти направления соответствуют фокусировке t_2 -моды и *L*-фононов. Термоэдс увлечения в направлении [100] $\alpha_{drag[110]}^{(100]}$, в котором фокусируется t_2 -мода, оказывается на 20% больше, чем $\alpha_{drag(110)}^{(110]}$.

В работе [38] показано, что длины пробега фононов различных поляризаций в модели изотропной среды равны друг другу и средней длине пробега Λ_{iso} . Они не зависят от упругих модулей, а полностью определяются геометрическими параметрами образцов. Результаты расчетов [35, 38] показали, что в направлениях фокусировки длина пробега в упруго анизотропных наноструктурах значительно превышет Λ_{iso} , тогда как в направлениях дефокусировки оказывается меньше. Поэтому из соотношений длин пробега в упруго анизотропных наноструктурах и модели изотропной среды можно судить о степени фокусировки фононов. На рисунке 5.11 (a, 6, в) зависимости Λ_{iso} приведены штриховыми линиями 5. Как видно из рисунка, в плоскости {100} для медленной и быстрой поперечных мод $\Lambda'_{[100]} > \Lambda_{iso}$, поэтому

для них преобладает эффект фокусировки фононов. Поскольку $\Lambda_{(100)}^{\prime 2} \ge \Lambda_{(100)}^{\prime 1}$, то эффект фокусировки для медленной t_2 -моды проявляется в большей степени, чем для быстрой t_1 -моды. Однако в этой плоскости для продольных фононов во всех направлениях $\Lambda_{(100)}^{L} << \Lambda_{iso}$, поэтому для них преобладает эффект дефокусировки. В плоскости {110} для медленной t_2 -моды $\Lambda_{(100)}^{\prime 2}$ сравнима по величине с Λ_{iso} : в значительной области углов в окрестности направлений [100] она больше Λ_{iso} , а в окрестности направлений [110] преобладает эффект дефокусировки, поэтому $\Lambda_{(110)}^{\prime 2} < \Lambda_{iso}$. В квадратных пленках с плоскостями {111} длины свободного пробега всех мод изотропны, причем длина пробега быстрой t_1 -моды $\Lambda_{(100)}^{\prime 1}$ по величине практически совпадает с Λ_{iso} (см. рисунок 5.11). Однако длины пробега L-фононов и медленной t_2 -моды оказываются больше Λ_{iso} , при этом для обоих мод доминирует эффект фокусировки, но он играет большую роль для медленной t_2 -моды, поскольку $\Lambda_{1100}^{\prime 2} \ge \Lambda_{1100}^{L}$.

Очевидно, чем больше длина пробега фононов при рассеянии на границах образца, тем больше вероятность их столкновения с электроном и тем больше их вклад в термоэдс увлечения. Из рисунка 5.11(а, в) видно, что средние длины пробега фононов в плоскостях {100} и {111} превосходят Λ_{iso} : $\Lambda_{[100]}^{(100]}$: $\Lambda_{iso}^{(111]}$: $\Lambda_{iso} = 1.6:1.2:1$. Поэтому для нанопленок калия с плоскостью {100} эффект фокусировки фононов выражен значительно сильнее, чем с плоскостью {111}, и термоэдс увлечения на 30% больше, чем для пленок с ориентацией {111}. Для пленок калия с ориентациями {100} и {111} доминирующий вклад в термоэдс увлечения вносит медленная t_2 -мода (см. рисунок 5.11). Она фокусируется при углах θ_{max} в плоскости {100}, а дефокусируется в направлении [110] в плоскостях {110}, длина пробега в первом случае в 1.9 раза больше, а во втором – в 1.02 раза меньше Λ_{iso} . Соотношение вкладов в термоэдс увлечения t_2 -моды для различных направлений имеет вид:

$$\alpha_{drag\{100\}}^{t_2[100]}:\alpha_{drag\{110\}}^{t_2[100]}:\alpha_{drag\{111\}}^{t_2[100]}:\alpha_{drag\{110\}}^{t_2[111]}:\alpha_{drag\{110\}}^{t_2[110]}:\alpha_{drag\{110\}}^{t_2[110]}=2.6:1.92:1.68:1.31:1.$$
(5.17)

Отметим, что вклад быстрой поперечной моды мал, а вклад t_2 -моды превышает вклад Lфононов для пленок с $\varepsilon \approx 0$ с ориентациями {100} и {111} в 6.9 и 2.6 раз, соответственно. Продольные фононы фокусируются в направлении [110] в плоскостях {110}, а дефокусируются в направлении [100] в плоскостях {100}. Длина пробега в первом случае 1.3 раза больше, а во втором – в 2.3 раза меньше- Λ_{iso} . Вклад L-фононов в термоэдс имеет максимальное значение в первом случае и минимальное значение во втором. Соотношение вкладов в термоэдс увлечения для различных направлений имеет вид:

$$\alpha_{\{110\}}^{L[110]}:\alpha_{drag\{110\}}^{L[111]}:\alpha_{\{100\}}^{L[110]}:\alpha_{\{100\}}^{L[100]}=2.29:2.26:1.37:1.$$
(5.18)

Для пленок с ориентацией {110} вклад *L*-фононов в термоэдс для направления [001] составляет 21%, а для *t*₂-моды – 76%. Однако в направлении фокусировки [011] вклад *L*- фононов достигает 49%, а медленной *t*₂-моды – 48%. Недостающие 3% для этих пленок обусловлены быстрой поперечной модой.

В работе [56] впервые проанализирована роль сдвиговых волн в электрон-фононом увлечении в пленках калия. Показано, что они играют значительную роль в термоэдс увлечения. Так, например, в пленках с ориентацией {100} вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды в термоэдс увлечения в 2.6 раз меньше вклада продольной компоненты, однако он в 1.7 раза превышает вклад *L*-фононов (см. рисунок 5.11г). Для пленок с ориентацией {111} вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды совпадает с вкладом *L*-фононов в термоэдс увлечения и в 1.5 раза меньше вклада продольной компоненты t_2 -моды совпадает с вкладом *L*-фононов в термоэдс увлечения и в 1.5 раза меньше вклада продольной компоненты (см. рисунок 5.11е). Для градиента температур в плоскости {110} вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды в термоэдс увлечения с вкладом *L*-фононов. Для направлений [100] он на 15% больше, а для направления [110], близкого к направлению фокусировки продольных фононов, в 2 раза меньше вклада $a_{1110}^{L(110)}$ (см. рисунок 5.11е). В направлениях [110] вклад продольной компоненты t_2 -моды в 2 раза меньше, а при учете сдвиговой компоненты вклад t_2 -моды практически сравнивается с вкладом *L*-фононов. Для ориентации плоскости пленки {111} вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды превышает вклад продольных фононов компоненты t_2 -моды превышает вклад продольных фононов. Смла и лефононов. Для влад сдвиговой компоненты t_2 -моды превышает вклад продольных фононов. Смла и t_2 -моды превышает вклад вриментации плоскости пленки {111} вклад сдвиговой компоненты t_2 -моды превышает вклад влад продольных фононов в обърна в зачительное владом t_2 -моды превышает вклад визисованом смазывают значительное влияние на анизотропию термоэдс увлечения и соотношение вкладов t_2 -моды и L-фононов.

Проанализируем изменение анизотропии термоэдс увлечения при увеличении толщины квадратных пленок в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов. В этом случае скорость релаксации фононов на границах ослабляется, а роль объёмных механизмов возрастает. В результате анизотропия вкладов всех колебательных мод в термоэдс монотонно уменьшается. Поскольку скорость релаксации продольных фононов на электронах в 25 раз больше, чем для медленной t_2 -моды, то с увеличением толщины образца относительный вклад L-фононов уменьшается и становится изотропным значительно быстрее, чем вклад t_2 -моды. В связи с этим минимальные величины термоэдс $\alpha_{drag[110]}^{(110]}$ и $\alpha_{drag[110]}^{(111]}$, в которые значительный вклад вносят L-фононы, убывает быстрее, чем максимальные значения термоэдс $\alpha_{drag[100]}^{(110]}$ и $\alpha_{drag[110]}^{(110]}$, определяемые главным образом вкладом t_2 -моды. При увеличении толщины нанопленок взаимная компенсация этих вкладов нарушается. В результате анизотропия и $\delta_{110}(D) = \alpha_{110}^{(100]}/\alpha_{110}^{(110]}$; $\delta^{(011)}(D) = \alpha_{001}^{(100)}/\alpha_{001}^{(111)}$, изменяется немонотонным образом (см. рисунок 5.12). Параметр $\delta_{(101]}(D) = \alpha_{001}^{(100)}/\alpha_{001}^{(110)}$ определяет отношение термоэдс увлечения в пленках с ориентациями {001} и {011} для направления



Рисунок 5.12 – Зависимости анизотропии термоэдс квадратных пленок с параметрами μ =100 и k_0 =50 от толщины *D* в кристаллах калия K5 с ε =0 (кривые 1, 3, 5) и ε =0.1 (кривые 2, 4, 6) для параметров: $\delta_{[110]}(D) = \alpha_{[110]}^{(100]} / \alpha_{[110]}^{(110]}$ (кривые 1, 2), $\delta^{(011]}(D) = \alpha_{[001]}^{(110]} / \alpha_{[011]}^{(110]}$ (кривые 3, 4) и $\delta_{[111]}^{(001]}(D) = \alpha_{[001]}^{(100]} / \alpha_{[001]}^{(111]}$ (кривые 5, 6).

градиента температур [011]. Параметр $\delta^{\{011\}}(D) = \alpha_{[001]}^{\{110\}} / \alpha_{[011]}^{\{110\}}$, равный отношению максимальных $\alpha_{[001]}^{\{110\}}$ к минимальным $\alpha_{[110]}^{\{110\}}$ значениям термоэдс, определяет анизотропию термоэдс увлечения в пленках с ориентацией $\{011\}$. Параметр $\delta_{\{111\}}^{\{001\}}(D)$ определяется отношением термоэдс увлечения в квадратных пленках с ориентациями {001} и {111}. Выразим анизотропию термоэдс увлечения в процентах: $\beta_{[110]} = (\delta_{[110]}(D) - 1) \cdot 100\%$ и рассмотрим её более подробно для нанопленок калия с различной концентрацией дислокаций. Физика этих эффектов достаточно проста. Максимальный вклад в термоэдс увлечения продольные фононы вносят в пленках с ориентацией {011} в направлении [011]. Он превышает вклад t_2 -моды $\alpha_{drag[110]}^{t2[110]}$ на 1%. В противоположность этому в пленках с ориентацией {001} вклад t2-моды имеет максимальное значение. Он превосходит вклад L-фононов в 6.9 раза (см. рисунок 5.12). С увеличением толщины, благодаря более сильной релаксации L-фононов на электронах, минимальные значения термоэдс увлечения $lpha_{drag\{110\}}^{[110]}$ убывают значительно быстрее, чем максимальные значения $\alpha_{drag(100)}^{[110]}$, определяемые главным образом вкладом t_2 -моды. В результате ориентационная анизотропия термоэдс $\beta_{11101}(D)$ для калия K5 с $\varepsilon=0$ возрастает от 42% при D= $2 \cdot 10^{-6}$ см, достигает максимума 57% при $D=2.2 \cdot 10^{-5}$ см, затем убывает до нуля при D>0.1 см (см. рисунок 5.12, кривая 1). Дополнительное рассеяние на дислокациях для кристаллов К4 с деформацией *є*=0.1 приводит к уменьшению анизотропии термоэдс: величина максимума уменьшается до 52% (см. рисунок 5.12, кривая 2). Аналогичным образом с толщиной изменяется $\delta^{\{011\}}(D) = \alpha_{[001]}^{\{110\}} / \alpha_{[011]}^{\{110\}}$, определяющий анизотропию термоэдс увлечения в параметр квадратных пленках с ориентацией {011} (см. рисунок 5.12, кривые 3 и 4). Физическая причина, приводящая к немонотонной зависимости параметра $\delta^{\{011\}}(D)$ от толщины пленки – та же самая, что и в предыдущем случае. Она обусловлена конкуренцией вкладов t₂-моды, определяющей максимальные значения термоэдс в направлении [001], и *L*-фононов, которые значительно сильнее рассеиваются на электронах и в значительной степени определяют минимальные величины термоэдс в направлении [011]. Однако анизотропия термоэдс $\beta^{\{011\}}(D)$ в пленках с ориентацией {011} существенно меньше: для пленок калия K5 без дислокаций (*ε*=0) параметр $\beta^{\{011\}}(D)$ возрастает от 14% при $D=2.10^{-6}$ см, достигает максимума 34% при $D=5.10^{-5}$ см, затем убывает до нуля при D>0.1 см (см. рисунок 5.12, кривая 5). Рассеяние на дислокациях для кристаллов K4 с деформацией *ε*=0.1 приводит к уменьшению максимума термоэдс до 32% (см. рисунок 5.12, кривая 4). В пленках с ориентациями {001} и {111} доминирующий вклад в термоэдс увлечения вносит t2-мода, а L-фононы играют существенно меньшую роль, чем в предыдущих случаях. Поэтому для них ориентационная анизотропия термоэдс увлечения имеет значительно меньшие величины, и параметр $\delta_{(11)}^{\{001\}}(D)$ монотонно убывает с увеличением толщины пленки (см. рисунок 5.12, кривые 5 и 6). Его максимальные значения для пленок калия с деформациями $\varepsilon = 0$ и $\varepsilon = 0.1$ при $D = 2 \cdot 10^{-6}$ см равны 28 и 27%.

Следует отметить, что эффекты, обусловленные влиянием фокусировки фононов на анизотропию термоэдс, открывают новые перспективы для экспериментальных исследований электрон-фононного увлечения в металлических пленках. Дело в том, что конкуренция вкладов t_2 -моды и *L*-фононов, обусловленная электрон-фононной релаксацией, приводит к немонотонной зависимости анизотропии термоэдс пленок калия. В результате для достаточно толстых пленок толщиной $D=10^{-3}$ см коэффициент $\beta_{[011]}(D)$ достигает 20%. Это делает рассчитанные в работе эффекты вполне доступными для экспериментальных исследований.

5.6 Анизотропия термоэдс увлечения в длинных пленках калия

Проведенный с использованием формул (5.3)-(5.9) анализ показал, что с увеличением длины пленок с ориентациями {100} и {111} интервалы углов, дающих основной вклад при усреднении длин пробега в плоскости пленок, значительно сужаются. Поэтому при переходе к длинным пленкам L>>W усреднение по углам Φ оказывается уже недостаточным, чтобы полностью размыть эффект фокусировки фононов (см. подробнее [38], раздел 5.2). В результате

термоэдс увлечения и длины пробега фононов в режиме кнудсеновского течения фононного газа для пленок с ориентациями {100} и {111} становятся анизотропными (см. рисунок 5.13а, б, кривые 1). Как видно из рисунка, основной вклад в анизотропию термоэдс увлечения и длин пробега фононов в длинных пленках калия в режиме граничного рассеяния вносит медленная t_2 -мода. Она фокусируется в направлениях вектора групповой скорости, в точках нулевой кривизны: в плоскости {100} при углах $\theta_{max}=36^{\circ}\pm \pi n/2$ (см. [46-48, 51]). В этих направлениях медленная t_2 -мода обеспечивает максимумы длин пробега фононов и термоэдс увлечения для пленок калия с ориентацией плоскостей {100} (см. рисунок 5.13, кривые 2а, 4а). Однако учет электрон-фононной релаксации приводит к более изотропной зависимости этих величин в плоскости пленок с ориентациями {100} и {111} (см. рисунок 5.13). При этом, в пленках калия с ориентациями {100} и {111} (см. рисунок 5.13). В то же время в направлениях [100] термоэдс увлечения в направлениях [100] уменьшается на 21%. В то же время в направлениях фокусировки и близких к ним рост плотности фононных состояний приводит к



Рисунок 5.13 – Угловые зависимости длин пробега (а) и термоэдс увлечения (нВ/К) (б, в, г) в пленках калия с ориентацией $\{100\}$ - (б), $\{110\}$ - (в) и $\{111\}$ - (г) при температуре 2 К (кривые 4, 4а), а также вкладов от продольных (кривые 3, 3а), медленной (кривые 2, 2а) и быстрой (кривые 1, 1а) поперечных мод, в плоскости $\{100\}$ для пленок калия без дислокаций с параметрами L = 2000W, W = 100D и D = 50 нм. Кривые 1, 2, 3, 4 – с учетом объемных механизмов, кривые 1а, 2а, 3а, 4а – режим кнудсеновского движения фононного газа.

резкому увеличению электрон-фононного рассеяния, и термоэдс увлечения уменьшается на 77%. Главным образом этот эффект обусловлен медленной t2-модой (см. рисунок 5.13). В пленках с ориентацией {111} отклонение зависимости термоэдс увлечения от изотропного малы – менее одного процента и менее 3% в пленках с ориентацией {100}. Это отклонение находится в пределах погрешности эксперимента, которая составляет не менее 5%. Однако ориентационная анизотропия термоэдс увлечения сохраняется: полная термоэдс в пленках с ориентацией {100} на 31% больше, чем с ориентацией {111}. Следует отметить, что ориентационная анизотропия термоэдс увлечения обусловлена влиянием упругой анизотропии на распространение фононов в пленках. В работах [32, 105, 121] показано, что основной вклад в теплопроводность пластин и пленок вносят фононы, распространяющиеся почти параллельно плоскости пленок. Если при этом ось пленки совпадает с направлением фокусировки, то фононы будут отклоняться от широкой грани к оси образца и длина свободного пробега возрастает, и соответственно, увеличиваются их вклады в теплопроводность и термоэдс увлечения (см., например, [38], раздел 3.5). Если ось пленки будет совпадать с направлением дефокусировки, то фононы будут отклоняться от оси образца к широкой грани пленки и длина их свободного пробега уменьшается, и соответственно, уменьшаются их вклады в теплопроводность и термоэдс увлечения. Для длинных пленок с ориентацией {110} зависимости термоэдс увлечения остаются эллипсоидальными с длинной осью вдоль направления [100], которая соответствует направлению фокусировки t2-моды. Короткая ось эллипсоида направлена вдоль [110], в котором фокусируются *L*-фононы. В направлении [100] термоэдс увлечения для длинных пленок (*L* =2000W), как и для квадратных пленок, на 20% больше, чем для направлений [110]. Следует отметить, что при увеличении длины пленки для выбранного направления теплового потока длина свободного пробега фононов при $k_0 > 10^3$ выходит на насыщение (см. рисунок 5.14a), перестаёт зависеть от длины пленки и полностью определяется поперечными размерами пленок D, W и направлением теплового потока (см., например, [38], рисунок 4.4). Вид этой зависимости от поперечных размеров пленки для модели изотропной среды фактически был определен ещё в работе Смолуховского [176], который исследовал течение молекулярного газа по бесконечной трубе прямоугольного сечения. Для распространения фононов в упруго изотропном диэлектрическом стержне прямоугольного сечения бесконечной длины в работе [33] было показано, что длина свободного пробега фононов логарифмически расходится при стремлении ширины пленки к бесконечности. Эта расходимость для пленок в модели изотропной среды ранее была отмечена в работе [105]. Действительно, из формулы (4.6) монографии [38] при $\mu > 1$ для модели изотропной среды следуют результаты [56, 74, 120]:

 $\Lambda_{c}(\mu) \approx D\{A + B \ln \mu\}, \quad A \approx 0.895, \qquad B = 0.75.$

(5.19)



Рисунок 5.14 – Зависимости приведенных длин свободного пробега фононов и термоэдс увлечения от параметра k_0 в пленках калия с параметрами W=100D и D=50 нм и ориентациями: {100} - кривые 1 и 2 для направлений [100] и θ_{max} ; {110} для направлений [100] и [110] - кривые 3 и 4; {111} для направлений [111] и [112] - кривые 5 и 6.

Для упруго анизотропных кристаллов коэффициенты *A* и *B* зависят от углов, определяющих направление теплового потока относительно осей кристалла [38,39]. Как видно из рисунка 5.15, с увеличением толщины пленки при $D>10^{-2}$ см длины свободного пробега и термоэдс увлечения выходят на насыщение при значениях, характерных для объёмных механизмов рассеяния, которые одинаковы для всех направлений теплового потока. Длина пробега быстрой t_1 -моды при $D>5\cdot10^{-5}$ см существенно превышает значение для *L*-фононов. Однако её вклад $\alpha_{drag}^{t_1}$ при толщине пленки $D=5\cdot10^{-6}$ см меньше в 5-14 раз, чем α_{drag}^{L} (см. рисунок 5.15). С увеличением толщины пленки вклад $\alpha_{drag}^{t_1}$ быстро возрастает и при $D \ge 3\cdot10^{-4}$ см становится больше вклада продольных фононов (см. рисунок 5.15, кривые 3b, 1d). Для объёмных кристаллов при D > 0.1 см вклады t_1 и t_2 мод составляют 78 и 18%, тогда как вклад *L*-фононов оказывается в 4.5 раза меньше, чем вклад быстрой t_1 -моды.

Другая ситуация складывается для длинных пленок толщиной порядка $D\sim10^{-5}$ см, когда граничное рассеяние и объёмные механизмы релаксации имеют одинаковый порядок величины, а длина образца будет больше длины пробега фононов для объёмных механизмов релаксации. В этом случае фонон испытает многократное рассеяние на электронах, прежде чем достигнет конца пленки. При этом длины пробега Λ^{2}_{Ph} , термоэдс увлечения и теплопроводность пленок с ориентациями плоскостей {100} и {111} становятся изотропными и перестают зависеть от направления градиента температуры в плоскости пленки. Для оценки длин пробега фононов из выражения для теплопроводности (5.6) выделим теплоемкость единицы объема C^{2}_{v} , среднюю



Рисунок 5.15 – Зависимости длин пробега (а) и термоэдс увлечения (мкВ/К) (б) от толщины D для пленок калия без дислокаций с параметрами L = 2000W, W = 100D при температуре 2 К (кривые 4, 4a, 4b), а также вкладов продольных (кривые 3, 3a, 3b), медленной (кривые 2, 2a, 2b) и быстрой (кривые 1, 1a, 1b) квазипоперечных мод. Кривые 1, 2, 3, 4 – для пленок с ориентаций {110} в направлении [100], кривые 1a, 2a, 3a, 4a – {110} в направлении [110], кривые 1b, 2b, 3b, 4b - {100} в направлении [100].

скорость фононов \bar{S}^{λ} , и определим длины свободного пробега фононов при рассеянии на электронах для каждой моды:

$$\Lambda_{ph}^{\lambda} = \kappa^{\lambda}(T) \left\{ 3C_{V}^{\lambda} \ \bar{S}^{\lambda} \right\}^{-1}, \qquad C_{V}^{\lambda} = \frac{2\pi^{2}k_{\mathbf{B}}^{4}}{15\hbar^{3}} T^{3} \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right\rangle, \quad \bar{S}^{\lambda} = \left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2}\right\rangle \left\langle \left(\left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right)\right\rangle \right\}.$$
(5.20)

Непосредственный расчет для длинных пленок L=2000W, W=100D и D=50 нм при T=2K дает: для медленной поперечной моды $\Lambda_{phe}^{t_2} \approx 360D$, для продольных фононов $\Lambda_{phe}^L \approx 25D$, а для быстрой поперечной моде благодаря малой величине константы электрон-фононной релаксации $\Lambda_{phe}^{t1} \approx 1160D$. Поэтому в длинных пленках $L >> \Lambda_{ph}^{t}$ фононы моды t_2 могут испытать многократное рассеяние на электронах, прежде чем достигнут конца пленки. Либо они последовательно испытают рассеяние на электронах и диффузно на границах пленки. Как уже нами показано, усреднение теплового потока по углам в плоскостях квадратных пленок с ориентациями {100} и {111} приводит к изотропной зависимости длин пробега и термоэдс увлечения. Поскольку наиболее сильно каустика фононов проявляется в плоскости {100}, то неудивительно, что для квадратных пленок с этой ориентацией термоэдс увлечения имеет максимальные значения. Преобладающую роль в этом эффекте играет медленная t_2 -мода.

Следует отметить, что фокусировка фононов в металлах приводит к двум эффектам для термоэдс увлечения, которые действуют в противоположных направлениях. Во-первых, в направлении фокусировки плотность фононных состояний имеет резкий максимум (см. рисунок 5.16, а также [13, 47]). Для волновых векторов в плоскости {100} это имеет место для *t*₂-моды

190

при углах θ_{max} =36°±πп/2 [35, 46, 47, 51]. Как видно из рисунка 5.16, в этих направлениях коэффициент усиления потока фононов без учета затухания фононных состояний обращается в бесконечность (см. подробнее [35], а также [13, 38]). Конечные значения для коэффициента усиления получаются только при усреднении по источнику или приемнику конечных размеров [13, 76, 82-85]. В результате происходит резкое усиление передачи импульса от дрейфующей системы фононов к электронам и, соответственно, к возрастанию термоэдс в этом направлении. Во-вторых, резкое увеличение плотности фононных состояний в окрестности направлений фокусировки усиливает рассеяние электронов и приводит к хаотизации электронного потока в



Рисунок 5.16 – Угловые зависимости коэффициентов усиления $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$ в кристаллах К для волновых векторов в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Штриховые линии 1 соответствуют модели изотропной среды, кривые 2 –продольным фононам, кривые 3 – быстрой поперечной t_1 -моде, кривые 4 – медленной t_2 -моде.

плоскости пленки. Если длина пленки будет больше длины пробега фононов для объёмных механизмов релаксации, то фонон испытает многократное рассеяние на электронах или выйдет из наиболее оптимального направления, параллельного плоскости пленки, и диффузно рассеется на границе. В результате и термоэдс, и теплопроводность длинных пленок калия становятся изотропными так же, как и для квадратных пленок, но физические причины, приводящие к этому эффекту – различны.

5.7 Выводы

Основные результаты пятой главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Анализ влияния анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение в наноструктурах показал, что в наноструктурах калия с поперечными размерами *D*<5·10⁻⁶ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа. В этом случае термоэдс увлечения

и решеточная теплопроводность нанопроводов и нанопленок анизотропны и следуют температурным зависимостям: $\alpha_{drag}(T) \approx B_2 T^4$ и $\kappa(T) \approx CT^3$. В образцах калия с поперечными размерами $D > 10^{-2}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации фононов – рассеяние на электронах и дислокациях. Термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность изотропны, не зависят от геометрических параметров образцов и следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \approx AT^3$ и $\kappa(T) \approx BT^2$.

2. Анизотропия термоэдс увлечения в наноструктурах калия при низких температурах обусловлена конкуренцией вкладов медленных квазипоперечных фононов, которые обеспечивают максимальные значения термоэдс в направлении [100], и продольных фононов, которые обеспечивают минимальные значения термоэдс в направлении [111]. С увеличением сечения образца благодаря более сильному рассеянию *L*-фононов на электронах анизотропия термоэдс увлечения во всех исследованных наноструктурах изменяется немонотонным образом: при переходе от режима кнудсеновского течения фононного газа она сначала возрастает, достигает максимума, а затем уменьшается до нуля при переходе к режиму объёмных механизмов релаксации.

3. Показано, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения наноструктур. По порядку величины он совпадает с вкладом *L*-фононов, а в некоторых направлениях превосходит его. Сдвиговые волны оказывают значительное влияние на соотношение вкладов *t*₂-моды и *L*-фононов, а также на анизотропию термоэдс увлечения.

4. В квадратных пленках с ориентациями {100} и {111} для произвольного направления потока тепла область усреднения по углам захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому длины пробега фононов, теплопроводность, а также термоэдс увлечения становятся изотропными в плоскости пленок, а их анизотропия определяется полностью зависимостью от ориентации плоскости пленки. В квадратных пленках с ориентацией {110} угол между направлениями фокусировки и дефокусировки фононов увеличивается в два раза относительно пленок с ориентациями {100} и {111}. Поэтому для произвольного направления не могут быть одновременно охвачены. В связи с этим длины пробега фононов и термоэдс увлечения в плоскости пленки с ориентацией {110} становятся анизотропными.

Основные результаты, приведенные в Главе 5, опубликованы в работах [A16, A17, A18, A23, A27].

6 Влияние анизотропии упругой энергии и сдвиговых волн на электронфононную релаксацию и электросопротивление благородных металлов

Теория электрон-фононной релаксации и явлений электронного переноса в металлах основана на работах Пайерлса, Блоха, Грюнайзена [16-18]. В этих работах, как и в последующем развитии теории в монографиях Вильсона, Займана и Блатта [19-23] для фононов использована модель изотропной среды. В этой модели только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами через потенциал деформации и давать вклад в электросопротивление металлов. Это приближение использовали в теории Блоха-Грюнайзена [17-23]. Предполагалось, что весь неравновесный импульс, полученный фононами от электронов, релаксирует внутри подсистемы фононов за счет резистивных процессов рассеяния и система фононов находится в равновесии. Поэтому обратную передачу импульса от фононов к электронам не учитывали. В отличие от изотропных сред, в кристаллах Au, Ag и Cu, имеющих кубическую симметрию, распространяются квазипродольные и квазипоперечные колебания. В общем случае эти волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными [24-28, 35], т.е. их векторы поляризации имеют и продольную, и поперечную компоненты (см. обзор 1 [160]). Учет упругой анизотропии кристаллов приводит к неколлинеарности групповых и фазовых скоростей фононов и, соответственно, их фокусировке [12-15, 34, 38, 46, 74, 75].

Ранее в наших работах [47-51] был рассчитан спектр, векторы поляризации фононов и проанализирована электрон-фононная релаксация в кристаллах калия. Анализ влияния упругой анизотропии на термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия позволил определить вклады колебательных мод в эти эффекты [47-51]. Эти исследования показали, что использование модели изотропной среды для фононов, положенное в основу теории электронного транспорта в металлах в [17-23], является некорректным. Нами было показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D$, где сопротивление, согласно теории Блоха-Грюнайзена [17-23], следует зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5$, квазипоперечные фононы, которые ранее не учитывались, вносят доминирующий вклад в электрон-фононную релаксацию (см. обзор 2 [175]). Их вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление калия составляет 92%, тогда как на продольные фононы остается 8% [50]. При этом релаксация на продольной компоненте медленной квазипоперечной моды обеспечивает 58% электросопротивления, а сдвиговая компонента – 32%, что в 4 раза больше вклада продольных фононов. При высоких температурах ($T >> \theta_D$), где сопротивление следует линейной зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_2 T$, вклад продольных фононов в электросопротивление оказывается в 4 раза больше, чем суммарный вклад релаксации электронов на квазипоперечных модах [50]. Эти

результаты показывают, что учет анизотропии упругой энергии является актуальным при изучении электронного переноса в металлах.

В нашей работе [53] рассчитан спектр, векторы поляризации фононов в благородных металлах и проанализировано влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление. Из согласования результатов расчета электросопротивления с экспериментальными данными при высоких температурах ($T >> \theta_D$), где оно следует линейной зависимости, определены константы E_{0t} , характеризующие взаимодействие электронов со сдвиговыми компонентами колебательных мод. Это определение основано на анализе Займана [21], который показал, что в этой области температур квантование энергии колебаний решетки не играет роли. В этом случае электросопротивление не зависит от деталей спектра фононов, а пропорционально среднему квадрату амплитуды тепловых колебаний атома, который пропорционален температуре. Оно обеспечивает высокотемпературную зависимость электросопротивления. Рассеяние электронов на деформационном потенциале обусловлено потенциальным полем [19-23], а на сдвиговых волнах – вихревым полем [25], поэтому они имеют разную природу и не интерферируют [50]. Вследствие этого они дают аддитивный вклад в электрон-фононную релаксацию (см. [50]) и их вклады в электросопротивление в высокотемпературной области легко могут быть выделены. Константы деформационного взаимодействия определяются энергиями Ферми $E_{0L} = (n \land N(\varepsilon_{\rm F}))$, поэтому константы E_{0t} могут быть легко выделены и найдены для всех благородных металлов. На необходимость учета влияния сдвиговых деформаций на электрон-фононную релаксацию в щелочных металлах указывал Займан [21]. Несмотря на значительное число работ, посвященных анализу температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов, нам неизвестны работы, в которых бы последовательно учитывали релаксацию электронов на сдвиговых волнах. Например, в работах [177-178] рассчитан спектр, векторы поляризации фононов, однако матричный элемент электрон-фононного взаимодействия взят в приближении деформационного потенциала: в виде квадрата скалярного произведения волнового вектора на вектор поляризации фонона. Таким образом учитывалось только взаимодействие электрона с продольной компонентой квазипоперечных мод. Результаты расчета электросопротивления благородных металлов, полученные в работах [177-178] (см. рисунки 1-3), оказывались значительно ниже экспериментальных данных [179, 180].

Анализ, проведенный в нашей работе [53], показал, что анизотропия упругой энергии и эффекты, обусловленные фокусировкой фононов, сказываются значительно сильнее на электросопротивлении в благородных металлах, чем в кристаллах калия. При низких температурах $T << \theta_D$ вклад квазипоперечных мод в электросопротивление Au, Ag, Cu составляет

99.5, 97, 98%, соответственно. Тогда как вклад продольных фононов менее 3%. При этом релаксация электронов на сдвиговых волнах, которую ранее не учитывали (в том числе в работах [177-178]), вносит доминирующий вклад в электросопротивление во всем диапазоне температур от 10 до 1000 К. При температурах, гораздо меньших температуры Дебая, этот вклад составляет 95, 91 и 95% для Au, Ag и Cu, соответственно. При T= 1000 К он уменьшается до 73 и 68% для кристаллов Au и Cu. Однако для кристаллов Ag при T>120 К он становится меньше вклада продольных фононов, а при Т=1000 К составляет 44% от полного электросопротивления. Учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных мод позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов в рамках модели Блоха-Грюнайзена с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К без использования других подгоночных параметров. Этот результат представляет несомненный научный интерес для широкой научной общественности. Однако в интервале от 10 до 100 К требуется дополнительный анализ процессов электрон-фононного и фонон-электронного переброса, а также взаимного увлечения потока электронов и трех фононных потоков, соответствующих трем ветвям спектра фононов. Необходимо также проанализировать основное предположение теории Блоха-Грюнайзена о равновесии фононной системы.

6.1 Динамические характеристики и фокусировка фононов в благородных металлах

При температурах, гораздо меньших температуры Дебая, основной вклад в релаксацию электронов в благородных металлах вносят длинноволновые фононы с волновым вектором $q << q_D (q_D - дебаевский волновой вектор). Поэтому для фононов мы воспользуемся моделью анизотропного континуума [47-50]. В этой модели спектр фононов <math>\omega_q^{\lambda} = S^{\lambda}(\theta, \varphi)q$, фазовая скорость $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и векторы поляризации $e^{\lambda}(q)$ для кубических кристаллов определяются из уравнений Кристоффеля согласно формулам (1.16)-(1.17) (см. также [35, 38]). Значения модулей упругости второго порядка для БМ c_{ij} взяты из работ [25, 27, 181]. В таблице 6.1 мы привели величины упругих модулей второго порядка, параметры анизотропии k-1, а также средние значения квадратов продольных компонент фононов различных поляризаций для кристаллов Au, Ag, Cu, K. Поэтому, казалось бы, анизотропия упругой энергии должна оказывать существенно меньшее влияние на электросопротивление благородных металлов, чем щелочных. Однако, как мы увидим далее, это не так. Параметр анизотропии k-1 имеет минимальное значение для Au, а для Cu он в три раза больше. Поэтому среднее значение квадрата продольной компоненты

анизотропии <i>k</i> -1 для кристаллов Au, Ag, Cu, K, Li, Na (по данным работ [25, 27, 181]).								
Соединение	c_{11}	c_{12}	C 44	ρ	<i>k</i> -1	$<(e^{L}n)^{2}>$	$\langle (\mathbf{e}^{tl}\mathbf{n})^2 \rangle$	$<({\bf e}^{t^2}{\bf n})^2>$
Au	2.016	1.697	0.454	19.5	0.38	0.996	3.22.10-4	3.3·10 ⁻³
Ag	1.315	0.973	0.511	10.6	0.85	0.99	$1.03 \cdot 10^{-3}$	$1.09 \cdot 10^{-2}$
Cu	1.684	1.214	0.754	8.94	1.19	0.98	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$1.67 \cdot 10^{-2}$
K	0.046	0.037	0.026	0.91	2.28	0.97	0.0028	0.032

Таблица 6.1 – Упругие модули второго порядка c_{ij} (10¹² дин/см²), плотность ρ (г/см³), параметр анизотропии *k*-1 для кристаллов Au, Ag, Cu, K, Li, Na (по данным работ [25, 27, 181]).







Рисунок 6.1 – Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей (10⁻⁵ с/см) для кристаллов: Au (кривые 1, 2, 3), Ag (кривые 1a, 2a, 3a) и Cu (кривые 1b, 2b, 3b). Для продольных – кривые 1, 1a и 1b, быстрых –кривые 2, 2a и 2b и медленных поперечных фононов – кривые 3,3a и 3b: (a) для волновых векторов в плоскости грани куба; (б) для волновых векторов в диагональной плоскости.

медленной *t*₂-моды для кристаллов Au в 3 раза меньше, чем для Ag, а для Cu в 1.5 раза больше, чем для Ад (см. таблицу 6.1). Следует отметить, что его значение в кристаллах калия в 2 раза больше, чем в меди и в 3 раза меньше, чем в натрии. Для иллюстрации эффекта фокусировки фононов в благородных металлах на рисунок 6.1 приведены изоэнергетические поверхности для всех колебательных мод. Из рисунков видно, что угловые зависимости изоэнергетических поверхностей для кристаллов Au, Ag и Cu качественно подобны. Наиболее анизотропной является медленная квазипоперечная *t*₂-мода. В направлении [011] для одной и той же энергии фононов волновые вектора моды t2, для кристаллов Au, Ag и Cu будут больше, чем для продольных фононов в 3.8, 3.1 и 3.1 раза, соответственно. Такое соотношение волновых векторов приведет к доминирующей роли t2-моды в электрон-фононной релаксации в благородных металлах. Её фокусировка характеризуется углами: $\theta_1 - \theta_4$ (см. подробнее раздел 1.4 и 1.5). На рисунке 6.1 приведены значения углов θ_n для t_2 -моды в кристаллах Au. Углы θ_2 и θ_3 определяют направления волновых векторов и групповых скоростей в точках нулевой кривизны, соответственно. Величина сектора фокусировки для волновых векторов $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$ определяется направлениями групповых скоростей $\mathbf{V}_{g}^{\prime 2}(\pm \theta_{4})$, коллинеарных $\mathbf{V}_{g}^{\prime 2}(\pm \theta_{3})$ в точках нулевой кривизны [38] (см. рисунок 6.1). В изотропной среде направление распространения фонона и его волнового вектора совпадают. Однако фононы, имеющие волновой вектор в секторе $-\theta_4 \le \theta \le \theta_4$, в кристаллах БМ распространяются в меньшем секторе, который определяется направлениями групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях $-\theta_3 \le \theta \le \theta_3$ (см. рисунок 6.1). На рисунке стрелками показаны векторы групповых скоростей \mathbf{V}_{p}^{t2} медленной *t*₂-моды для Au. Все фононы, имеющие волновой вектор в области $\pi/2 - \theta_4 \le \theta \le \pi/2 + \theta_4$ ($\theta_4 = 0.72$ для Au), распространяются в меньшем секторе $\pi/2 - \theta_3 \le \theta \le \pi/2 + \theta_3$ ($\theta_3 = 0.39$ для Au). При количественном описании распространения фононных импульсов в упруго анизотропных кристаллах Н.Ј. Maris ввел понятие коэффициентов усиления потока фононов $A^{\lambda}(\theta, \varphi)$ [13], который определяется отношением потока фононов данной поляризации λ для выбранного направления волнового вектора к соответствующему потоку в изотропной среде. Точное аналитическое выражение для коэффициента $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ через угловые компоненты групповой скорости и их производные найдено в [70] и определяется выражением (1.41).

Воспользуемся выражениями для фазовых скоростей $S^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и проанализируем угловые зависимости коэффициентов усиления в благородных металлах (см. рисунок 6.2). В модели изотропной среды коэффициент $A^{\lambda}(\theta, \varphi) = 1$. Поэтому интервалы углов, в которых выполняется неравенство $A^{\lambda}(\theta, \varphi) > 1$, можно отнести к области фокусировки фононов, а интервалы, в которых выполняется обратное неравенство – к области дефокусировки фононов. Так, например,



Рисунок 6.2 – Угловые зависимости коэффициентов усиления $A^{\lambda}(\theta, \phi)$ в кристаллах Au (кривые 1, 2, 3) и Ag (кривые 1a, 2a, 3a) и Cu (кривые 1b, 2b, 3b): для продольных – кривые 1, 1a и 1b, быстрых –кривые 2, 2a и 2b и медленных поперечных фононов – кривые 3, 3a и 3b: (a) для волновых векторов в плоскости грани куба; (б) для волновых векторов в диагональной плоскости.

в кристаллах Au для медленной t_2 -моды коэффициент $A^{t_2}(\theta, \phi) > 1$ в интервале углов $0 < \theta < 0.47$ и $\pi/2$ -0.47 $< \theta < \pi/2$ +0.47, тогда как для серебра и меди область фокусировки сужается до $0.06 < \theta < 0.46$ и $0.14 < \theta < 0.46$, соответственно. Как видно из рисунков 6.1 и 6.2, наиболее анизотропной в кристаллах Au, Ag и Cu является медленная t_2 -мода. Для продольных фононов имеется область слабой фокусировки, которая расположена в окрестности направления [110]: в кристаллах Au – для углов θ от 0.49 до 1.08, в Ag – от 0.43 до 1.13 и в Cu – от 0.4 до 1.16. Очевидно, что в точках нулевой кривизны происходит переход от выпуклых к вогнутым областям, и кривизна поверхности обращается в ноль. В трехмерном случае эти точки образуют линии нулевой кривизны на изоэнергетической поверхности [13]. В этих направлениях коэффициент усиления медленной t_2 -моды обращается в бесконечность, поскольку эти направления математически

198

I тип	$\theta_1^{t2\{100\}}$	$ heta_2^{t2\{100\}}$	$ heta_{3}^{t2\{100\}}$	$ heta_4^{t2\{100\}}$	$n_{FI}^{t2\{100\}}$	$n_{DI}^{t2\{100\}}$	$n_{FD}^{t2\{100\}}$
Cu	37.2°	15.58°	26.53°	42.5°	1.602	0.1354	11.8
Ag	36.9°	17.3°	24.67°	42°	1.703	0.1476	11.5
Au	37.12°	19.46°	22.57°	41.8°	1.852	0.1427	13
K	41.2°	14.06°	36°	44.39°	1.23	0.068	18.2

Таблица 6.2 – Значения углов $\theta_i^{\lambda\{100\}}$ и средняя плотность состояний в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости {100} для моды t_2 в металлах K, Au, Ag и Cu.

соответствуют бесконечному потоку фононов от точечного источника тепла [13] (см. также [14, 160]). В работах [13, 34, 44] для получения конечных значений коэффициента усиления проводили усреднение по источнику или приемнику конечных размеров. Для качественной оценки влияния фокусировки на плотности фононных состояний в работах [38, 75] предложено для каждой из областей фокусировки и дефокусировки вводить средние значения ПФС (см. параграф 1.3). Очевидно, что средние значения ПФС конечны и для них проблема расходимости не возникает. Этот подход дает достаточно грубые оценки угловых распределений ПФС, однако для щелочных и благородных металлов он определяет области направлений, в которых электронфононная релаксация будет происходить значительно интенсивнее, чем в модели изотропной среды. Поэтому мы выделили области фокусировки и дефокусировки и дефокусировки фононов и ввели средние значения ПФС для каждой из областей (см. таблицу 6.2). Это дает нам возможность определить относительную ПФС для каждой моды в областях фокусировки $n_{FI}^{\lambda(100)}$ и дефокусировки $n_{DI}^{\lambda(100)}$ по отношению к изотропной среде [38]:

$$n_{FI}^{t2\{100\}} = N_F^{t2\{100\}} / N_{Iso} = \theta_4^{t2\{100\}} / \theta_3^{t2\{100\}},$$

$$n_{DI}^{\lambda\{100\}} = N_D^{\lambda\{100\}} / N_{Iso} = (\pi - 4\theta_4^{\lambda\{100\}}) / (\pi - 4\theta_3^{\lambda\{100\}}).$$
(6.1)

Из выражений (6.1) получим отношения средних ПФС для областей фокусировки и дефокусировки фононов, которые характеризуют её анизотропию [38, 75]:

$$n_{FD}^{\lambda\{100\}} = N_F^{\lambda\{100\}} / N_D^{\lambda\{100\}} = \theta_4^{\lambda\{100\}} \left(\pi - 4\theta_3^{\lambda\{100\}}\right) / \left[\left(\pi - 4\theta_4^{\lambda\{100\}}\right) \theta_3^{\lambda\{100\}}\right]$$
(6.2)

Как видно из таблицы 6.2, увеличение параметра анизотропии упругой энергии k-1 в БМ приводит не к увеличению параметра $n_{Fl}^{t2\{100\}}$, характеризующего среднюю плотность фононных состояний в области фокусировки t_2 -моды относительно значения в модели изотропной среды, а к её уменьшению. При этом средние значения ПФС в области фокусировки относительно изотропной среды увеличиваются менее чем в 2 раза. Однако в области дефокусировки фононов ПФС для t_2 -моды оказывается на порядок меньше, чем в модели изотропной среды. Поэтому ПФС для t_2 -моды в области фокусировки оказывается больше, чем в области дефокусировки, на

I тип	$ heta_3^{L\{100\}}$	$ heta_4^{L\{100\}}$	$n_{FI}^{L\{100\}}$	$n_{DI}^{L\{100\}}$	$n_{FD}^{L\{100\}}$
Cu	21.5°	7.87°	2.7	0.63	4.32
Ag	19.8°	12.6°	1.6	0.78	2.01
K	5.39°	25.5°	4.7	0.49	9.65

Таблица 6.3 – Значения углов $\theta_i^{L(100)}$ и средняя плотность состояний для продольных фононов в областях фокусировки и дефокусировки в плоскости {100} в щелочных и благородных металлах Си, Ад и К.

порядок величины (см. таблицу 6.2). Отметим, что в кристаллах меди фокусировка оказывает более сильное влияние на ПФС для *L*-фононов, чем в серебре (см. рисунок 6.3 и таблицу 6.3). ПФС в них превосходит значение для изотропной среды в 2.7 и 1.6 раза, соответственно (см. таблицу 6.3). Как видно из рисунка 6.3, средние значения ПФС в областях фокусировки фононов для Au, Ag и Cu на 60-85% превышают значения в модели изотропной среды, тогда как для калия всего на 20%. Анализ распределения ПФС в нашем случае носит иллюстративный характер, однако эта проблема может оказаться актуальной при анализе электронного транспорта в металлических микро и наноструктурах на основе благородных металлов.



Рисунок 6.3 – Угловое распределение ПФС в кристаллах Сu, Ag, Au и K для волновых векторов в плоскости {100}: кривые 1, 1а – для Cu, кривые 2, 2а – для Ag, кривая 3 – для Au и кривая 4 – для K. Кривые 1, 2, 3, 4 для *t*₂-моды, кривые 1а,2а- для продольных фононов в кристаллах Cu и Ag.

6.2 Электрон-фононная релаксация в благородных металлах

В БМ подсистема электронов является сильно вырожденной. Благодаря законам сохранения энергии и импульса в электрон-фононной релаксации могут участвовать только электроны, находящиеся в пределах теплового размытия поверхности Ферми. Влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию в БМ рассматривается так же, как и для кристаллов калия (см. раздел 4.1). Вектор поляризации фононов $e^{2}(q)$ в БМ может быть разложен на продольную и поперечную компоненты. Взаимодействие электрона с продольными компонентами колебательных мод описывается потенциальным полем и может быть учтено в рамках стандартной теории потенциала деформации [21-22], тогда как взаимодействие с поперечными компонентами колебательных мод описываются вихревым полем [25, 50]. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют. Вследствие этого они входят в матричный элемент (4.4) аддитивным образом [20]. Поэтому Фурье-образ матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в БМ может быть представлен в виде:

$$\left(C_{0}^{\lambda}(\theta,\phi)\right)^{2} \approx \left(E_{eff}^{\lambda}\right)^{2} \hbar / \left(S^{\lambda}(\theta,\phi)\rho\right), \qquad \left(E_{eff}^{\lambda}\right)^{2} = \left(E_{0L}^{2}\left(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right)^{2} + E_{0t}^{2}\left(\left[\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right]^{2}\right)\right), \quad E_{0L} = \left(n / N(\varepsilon_{\mathrm{F}})\right) = \left(2 / 3\right)\varepsilon_{\mathrm{F}}.$$
(6.3)

Оценки показывают, что средние значения для смешанных произведений в БМ на 5-7 порядков меньше средних значений $\langle (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})^2 \rangle$ и $\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}]^2 \rangle$, и могут быть опущены (см. таблицу 6.4). Как и в целочных металлах, квадрат эффективной константы связи $(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi))^2$ в благородных металлах является функцией углов θ и φ , определяющих направление волнового вектора относительно кристаллографических осей. Эти зависимости определяются квадратами

		L	t_1	t_2
	$\langle (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})^2 \rangle$	0.996	3.22.10-4	3.3.10-3
Au	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}]^2 \rangle$	0.0036	0.9997	0.9967
	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}] \cdot(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})\rangle$	1.39.10-7	2.47.10-9	1.58·10 ⁻⁷
	$\langle (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})^2 \rangle$	0.988	1.03.10-3	1.09.10-2
Ag	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}]^2 \rangle$	0.0119	0.999	0.989
	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}] \cdot(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})\rangle$	1.05.10-6	1.93.10-8	5.07.10-7
	$\langle (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n})^2 \rangle$	0.98	0.0014	0.016
Cu	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}]^2 \rangle$	0.017	0.999	0.985
	$\langle [\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}] \cdot (\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}) \rangle$	5.78·10 ⁻⁷	3.99.10-8	6.13.10-8

Таблица 6.4 – Средние значения продольных и поперечных компонент колебательных мод для благородных металлов Au, Ag и Cu

продольных и поперечных компонент векторов поляризации, а также фазовой скоростью фононов. Из сопоставления результатов расчета электросопротивления в высокотемпературной области с экспериментальными данными были найдены константы связи электронов со сдвиговыми волнами в БМ. Константы E_{0t} для кристаллов Au, Ag, Cu оказались равными 1.5, 0.92, 2.1 эВ. Отметим, что константы E_{0t} для благородных металлов на порядок величины больше, чем для кристаллов калия. Это неудивительно, так как для кристаллов калия отклонение изоэнергетической поверхности от сферы Ферми $|K-K_F|/K$ мало и составляет всего 7% [101], тогда как для кристаллов Au, Ag и Cu анизотропия электронного спектра существенно выше. В направлениях, близких к [111], сфера Ферми касается границ зоны Бриллюэна и для электронов реализуются открытые траектории [182-185]. Именно анизотропия спектра электронов проводимости позволяет им взаимодействовать со сдвиговыми деформациями, т.е. с поперечной компонентой колебательных мод (см., например, [162-163]). Следует отметить, что в благородных металлах среднее по углам значение квадрата эффективной константы связи ($E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi)$)² для продольных фононов значительно превышает величину для медленной t_2 -моды. Их отношения для кристаллов Au, Ag и Cu равны 6, 10 и 4.8, соответственно.

Проведем усреднение по векторам поляризации в эффективных константах взаимодействия $\left(E_{eff}^{\lambda}\right)^2 = \left(E_{0L}^2\left\langle\left(\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right)^2\right\rangle + E_{0t}^2\left\langle\left(\left[\mathbf{e}^{\lambda}\mathbf{n}\right]^2\right)\right\rangle\right)$ и оценим вклады в релаксацию импульса электронов на фононах в БМ от продольных и поперечных компонент для всех колебательных мод. Для продольных фононов в кристаллах Au, Ag и Cu значение $E_{e\!f\!f}^L$ отличается от E_{0L} менее чем на 1%. Для них продольная компонента обеспечивает подавляющий вклад в релаксацию импульса. Для медленной t_2 -моды $E_{eff}^{t_2} \approx 1.51$; 1; 2.18 эВ для кристаллов Au, Ag и Cu, соответственно. Для них поперечная компонента обеспечивает 99%, 92% и 96% релаксации электронов на фононах, тогда как вклад продольной компоненты мал. Для быстрой поперечной моды в благородных металлах продольная компонента на три порядка величины меньше поперечной (см. таблицу 6.1). Поэтому для неё сдвиговая компонента *E*_{0t} практически полностью определяет эффективные константы $\langle (E_{eff}^{\prime 1})^2 \rangle$, а вклад продольных компонент составляет менее 1%. Следует отметить, что в отличие от модели изотропной среды, эффективная константа связи $\left(E_{_{eff}}^{^{\lambda}}(heta, arphi)
ight)^{\!\!2}$ является функцией углов heta и arphi, определяющих направление волнового вектора относительно кристаллографических осей (см. рисунок 6.4). Эти зависимости определяются квадратами продольных и поперечных компонент векторов поляризаций. В отличие от кристаллов калия (см. рисунок 6.1, а также [25]), для благородных металлов анизотропия эффективной константы $\left(E_{eff}^{\lambda}\right)^2$ мала для всех мод (см. рисунок 6.4). Как видно из рисунка 6.4,



Рисунок 6.4 – Зависимости квадрата эффективной константы электрон-фононной связи $\left(E_{eff}^{\lambda} / E_{0L}\right)^2$ в кристаллах меди для волновых векторов в плоскости грани куба (а): кривая 1 - для продольных фононов, кривая 2 - для медленной t_2 -моды, кривая 3 - для быстрой t_1 -моды; (б) кривая 1 - для медленной t_2 -моды, кривая 2 – для вклада сдвиговой компоненты t_2 -моды, кривая 3 - для вклада продольной компоненты медленной t_2 -моды.

для продольных фононов (кривая 1) отклонение от изотропного распределения для меди не превышает 4%. Для кристаллов Au и Ag параметр анизотропии k-1 заметно меньше, чем для Cu, поэтому отклонение от изотропного распределения $(E_{eff}^{\prime 2})^2$ оказывается меньше. Для медленной t_2 -моды в Cu (кривая 2) величина $(E_{eff}^{\prime 2}(\theta, \varphi))^2$ в 5 раз меньше, чем для продольных фононов. Её отклонение от изотропного распределения составляет менее 13%. Это обусловлено тем, что для продольных и поперечных фононов основной вклад в $(E_{eff}^{\prime 2})^2$ вносит продольная и сдвиговая компонента, соответственно. Если для продольных фононов основной вклад пропорционален (e^L **n**)², то для поперечных фононов сдвиговая компонента пропорциональна [$e^{\prime 2}$ **n**]². Обе величины близки к 1 и слабо зависят от углов. В отличие от меди в кристаллах калия вклад продольной компоненты t_2 -моды обеспечивает анизотропию константы связи ($E_{eff}^{\prime 2}(\theta, \varphi)$)², при этом её максимальные значения превосходят минимальные в 15 раз (см. рисунок 4.1).

6.3 Поверхность ферми в благородных металлах

Поверхности Ферми (ПФ) благородных металлов отличаются от щелочных. Анализ поверхности Ферми при использовании различных приближений [182-186] показал, что ее отклонение от изотропного приближения мало и в среднем составляет порядка 5% (см. рисунок 6.5). Если в зону Бриллюэна ГЦК решетки БМ поместить сферу Ферми, определенную в модели

203



Рисунок 6.5 – (а) Поверхность Ферми меди взята из работы [182]. (б) Сплошные кривые - сечение поверхности Ферми меди плоскостью {110}, согласно работам [182-184], штриховая кривая – изотропная аппроксимация.

свободных электронов, то ближе всего она подойдет к границе зоны в окрестности центра шестиугольной грани L. Поэтому в окрестности направлений [111] следует ожидать максимального искажения ПФ из-за влияния решеточного потенциала. В результате этого влияния она касается границы зоны Бриллюэна, и на поверхности Ферми БМ возникают 8 перешейков между соседними зонами Бриллюэна в окрестности направлений [111] (см. рисунок 6.5а).

Впервые такую модель предложил Пиппард [183] при интерпретации данных по аномальному скин-эффекту в меди. Он показал, что ПФ касается границы зоны Бриллюэна в направлениях, близких к направлениям [111]. Эту же модель использовал Шенберг [184] при интерпретации эффекта де Гааза-ван Альфена. Площадь этих дырок на ПФ мала: их суммарная площадь составляет 0.036, 0.063 и 0.08% от полной поверхности Ферми для кристаллов Au, Ag и Cu, соответственно (см. таблицу 6.5). Процессы электрон-фононного переброса ограничены областями шеек на поверхности Ферми, близкими к направлениям [111], суммарная площадь которых на порядок меньше полной поверхности Ферми. Поэтому нормальные процессы рассеяния должны преобладать над процессами переброса. Расчёты ПФ [42-45, 48] показали, что суммарный объём конусов пустых состояний, которые опираются на области шеек между зонами Бриллюэна, мал по сравнению с полным объёмом сферы Ферми: для кристаллов Au, Ag и Cu он составляет 0.07, 0.04 и 0.09% от полного объёма сферы Ферми, соответственно (см. таблицу 6.5). Эти состояния перераспределяются выше штриховой линии на рисунке 6.5 (б) и обуславливают плавные локальные максимумы в окрестности направлений типа [100]. Поэтому отклонение ПФ от сферы малы [182-186]. Однако, несмотря на малость областей шеек между соседними

параметры	Au	Ag	Cu		
а	4.078 A	4.086 A	3.6153 A		
k _F	1.20·10 ⁸ см ⁻¹	1.20·10 ⁸ см ⁻¹	1.36·10 ⁸ см ⁻¹		
п	5.9·10 ²² см ⁻³	5.86·10 ²² см ⁻³	8.47·10 ²² см ⁻³		
\mathcal{E}_F	5.53 эВ	5.49 эВ	7 эВ		
E_{0L}	3.69 эВ	3.66 эВ	4.67 эВ		
E_{0t}	1.5 эВ	0.92 эВ	2.1 эВ		
<i>m</i> *	0.999	1.0027	1.0044		
Радиус	0.16 d	0.12 d	0.18 d		
шейки					
d	$1.34 \cdot 10^8 \mathrm{cm}^{-1}$	1.34·10 ⁸ см ⁻¹	$1.51 \cdot 10^8 \mathrm{cm}^{-1}$		
S_d	$0.144 \cdot 10^{24} \text{cm}^{-3}$	$0.081 \cdot 10^{24} \mathrm{cm}^{-3}$	0.23.10 ²⁴ см ⁻³		
S_F	$18.2 \cdot 10^{24} \mathrm{cm}^{-3}$	$18.2 \cdot 10^{24} \mathrm{cm}^{-3}$	23.2·10 ²⁴ см ⁻³		
$8 S_d / S_F$	0.063	0.036	0.08		
$8 V_d / V_F$	0.071	0.04	0.089		
Здесь S _d - площадь дырки на поверхности Ферми, V _d - объём конуса пустых состояний.					

Таблица 6.5 – Электронные параметры в БМ согласно работам [182-186].

поверхностями Ферми, они могут играть важную роль в релаксации импульса электронов и фононов в БМ. Их учет необходим при исследовании влияния резистивных процессов электронфононного и фонон-электронного переброса на взаимное увлечение электронов и фононов в БМ. Эти процессы не вымораживаются и могут происходить при любой сколь угодно низкой температуре. В низкотемпературной области $T << \theta_D^{\lambda}$, когда процессы фонон-фононного переброса в значительной степени выморожены, процессы фонон-электронного переброса могут играть значительной системе. Далее в пренебрежении анизотропией поверхности Ферми и проанализируем влияние анизотропии упругой энергии на электросопротивление БМ для параметров, приведенных в таблице 6.5.

6.4 Влияние анизотропии упругой энергии на электросопротивление благородных металлов

Рассмотрим баланс импульса в системе электронов, взаимодействующих с фононами в изотермических условиях. Электрическое поле считается достаточно слабым, чтобы можно было

ограничиться линейным приближением. Исходным является кинетическое уравнение для неравновесной функции распределения электронов *f*(**k**,**r**) [21-23, 51]:

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_k \nabla_r) f_{\mathbf{k}} = I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_q^{\lambda})$$
(6.4)

Здесь $\mathbf{v}_k = \partial \varepsilon_k / \hbar \partial \mathbf{k}$ – групповая скорость электронов, I_{ei} и I_{eph} – интегралы столкновений электронов с примесями и фононами. Расчет электросопротивления БМ производится аналогично тому, как это было сделано для кристаллов калия (см. главу 4). Предполагается, что фононная подсистема остается в равновесии, а для электронной подсистемы реализуется дрейфовое локально-равновесное состояние, описываемое в гидродинамическом приближении [167-169]:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{u}) = f_{\mathbf{k}} = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon_{k} - \zeta - \hbar \mathbf{k}\mathbf{u}}{k_{B}T}\right) + 1\right)^{-1} = f_{0}(\varepsilon_{k}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} = (\hbar \mathbf{k}\mathbf{u})\left(\frac{\partial f_{0}}{\partial \varepsilon_{k}}\right).$$
(6.5)

Здесь $f_0(\varepsilon_k)$ – функция Ферми, **u** – дрейфовая скорость электронов. Умножим уравнение (6.4) на $\hbar \mathbf{k}$ и просуммируем по импульсам электронов, тогда получим уравнение баланса импульса, из которого находим скорость дрейфа **u**:

$$|e|n_{e}E^{\alpha} = m_{F}n_{e}u^{\alpha} \Big[v_{eph}(k_{F}) + v_{ei}(k_{F}) \Big].$$
(6.6)

Здесь $v_{eph}(k_F, T)$ и $v_{eh}(k_F, T)$ – транспортные скорости релаксации или скорости релаксации импульса электронов на фононах и примесях. Рассеяние на примесях обеспечивает выход электросопротивления на постоянное значение. Мы не будем рассматривать этот эффект, а сосредоточимся на анализе фононной части электросопротивления, для которой имеем:

$$\rho_{e-ph}(T) = \left(m_F / e^2\right) \mathcal{V}_{eph}(k_F, T) \tag{6.7}$$

В результате фононную часть электросопротивления $\rho_{e-ph}(T) = (m_F / e^2) v_{eph}(k_F, T)$ можно представить в виде интеграла от произведения угловой части B_{Ω}^{λ} на интеграл B_Z^{λ} от функции распределения наиболее эффективных для неё фононов $\Phi(Z_q^{\lambda})$:

$$\rho_{e-ph}(T) = \sum_{\lambda} A(Z_D^{\lambda}) \cdot B_{\Omega}^{\lambda}(T) , \qquad B_{\Omega}^{\lambda}(T) = \frac{(m_F)^2 (k_B T)^5}{6\pi^3 \hbar^7 e^2 \rho n_e} \int_0^{\infty} d\Omega_q \frac{\left(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^2}{\left\{S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right\}^6}, \quad Z_q^{\lambda} = \frac{\hbar \omega_q^{\lambda}}{k_B T}.$$
(6.8)

$$A(Z_{D}^{\lambda}) = \int_{0}^{Z_{D}^{\lambda}} dZ_{q}^{\lambda} \Phi(Z_{q}^{\lambda}) , \qquad \Phi_{eph}(Z_{q}^{\lambda}) = (Z_{q}^{\lambda})^{4} N_{q\lambda}^{0} \int dy_{k} f_{0}(dy_{k}) \Big[1 - f_{0} \Big(y_{k} + Z_{q}^{\lambda} \Big) \Big] .$$
(6.9)

При температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D^{\lambda}$, верхний предел интегрирования оказывается гораздо больше единицы $Z_D^{\lambda} = \theta_D^{\lambda}/T >> 1$. Его можно распространить до бесконечности для всех мод. Тогда коэффициент $A(Z_D^{\lambda})$ не зависит от λ и его можно вынести

из-под углового интеграла. В этом случае электросопротивление для всех мод будет следовать зависимости, характерной для теории Блоха-Грюнайзена [17-23]:

$$\rho_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5, \quad B_1 = \left\{ A_{\infty} \frac{(m_F)^2 (k_B)^5}{6\pi^3 \hbar^7 e^2 \rho n_e} \right\} \sum_{\lambda} B^{\lambda}, \qquad A_{\infty} = \int_0^{\infty} dZ_q^{\lambda} \Phi(Z_q^{\lambda}), \quad B^{\lambda} = \int_0^{\infty} d\Omega_q \frac{\left(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi) \right)^2}{\left\{ S^{\lambda}(\theta, \varphi) \right\}^6}. \tag{6.10}$$

Отношение вкладов различных мод определяется отношениями угловых коэффициентов:

$$\rho_{e-ph}^{t^2}:\rho_{e-ph}^{t^1}:\rho_{e-ph}^{L}=B^{t^2}:B^{t^1}:B^{L}.$$
(6.11)

Как видно из формул (6.10) вклады различных мод в электросопротивление прямо пропорциональны квадрату константы взаимодействия электронов с фононами и обратно пропорциональны шестой степени фазовой скорости фононов. Хотя среднее по углам значение квадрата эффективной константы связи $(E_{eff}^{\lambda}(\theta, \varphi))^2$ для *L*-фононов в кристаллах Au, Ag и Cu превышает величины для медленной *t*₂-моды в 6, 10 и 4.8, соответственно. Однако отношения средних значений фазовых скоростей дает $\langle S^L \rangle / \langle S'^2 \rangle \approx 3$. Шестая степень этого отношения обеспечивает подавляющее преимущество релаксации электронов на медленной *t*₂-моде на два порядка величины. В результате для БМ при низких температурах получим:

(Au) $B_1^{t^2}: B_1^{t^1}: B_1^L = 0.845: 0.15: 0.005$,

(Ag)
$$B_1^{t2}: B_1^{t1}: B_1^L = 0.84: 0.13: 0.03$$
,

(Cu)
$$B_1^{\prime 2}: B_1^{\prime 1}: B_1^L = 0.86: 0.12: 0.02.$$
 (6.12)

Таким образом, квазипоперечные фононы вносят доминирующий вклад в электрон-И БМ. фононную релаксации электросопротивление Иx суммарный вклал В электросопротивление кристаллов Au, Ag и Cu составляет 99.5, 97 и 98%, тогда как на продольные фононы остается менее 3%. Как видно из формулы (6.10), доминирующая роль медленной моды в электросопротивлении благородных металлов обусловлена анизотропией упругой энергии. Так, например, для золота квадрат эффективной константы связи продольных фононов с электронами $(E_{eff}^{L})^{2}$ в 6 раз превосходит значение для медленной t_{2} -моды. Однако в направлениях типа [110] фазовая скорость t2-моды для золота в 3.8 раза меньше, чем для продольных фононов, а отношение усредненных значений $\langle S^L \rangle / \langle S'^2 \rangle \approx 3$ (см. рисунок 6.1). Шестая степень этого отношения для золота дает величину на два порядка большую. Поэтому t2мода вносит доминирующий вклад в релаксацию электронного импульса. В результате вычисления угловых средних с использований формул (6.8) для отношения $B_{\Omega}^{\prime 2}: B_{\Omega}^{L}$ в кристаллах Au, Ag и Cu получим: 160, 25 и 43. Таким образом, вклад медленной t2-моды в электросопротивление БМ существенно превосходит вклад *L*-фононов. Одной из важных проблем при анализе электросопротивления благородных металлов при низких температурах

является учет неупругости электрон-фононного рассеяния. Как уже отмечалось ранее в [53, 175], релаксация импульса электронов обеспечивается всеми термически активированными фононами, а максимальный вклад в электросопротивление вносят фононы с наибольшим волновым вектором, допускаемым функцией Планка. Функция распределения наиболее эффективных для электросопротивления БМ фононов $\Phi_{eph}(Z_q^\lambda)$ отлична от нуля в интервале $1 < Z_q^{\lambda} < 12$, достигает максимума при $Z_q^{\lambda} = 5$ и быстро убывает при $Z_q^{\lambda} > 12$ за счет функции распределения Планка (см. рисунок 6.6). Поэтому основной вклад в электросопротивление при низких температурах вносят не «вертикальные» переходы $\hbar \omega_q^{\lambda} \approx \left(k_B T\right)$ или «горизонтальные» переходы по терминологии Займана [21, 22], для которых волновой вектор q~ k_F, а «косые» переходы, для которых энергия фононного кванта лежит в интервале $(k_B T) \le \hbar \omega_a^{\lambda} \le 12(k_B T)$ (см. рисунок 6.7). Поскольку функция $\Phi_{eph}(Z_q^{\lambda})$ практически совпадает с $J_5(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^5 N_q^{\lambda}(N_q^{\lambda}+1)$, которая определяет вклад неупругости при решении задачи вариационным методом [19-23], то расчет электросопротивления БМ в гидродинамическом приближении [53] согласуется вариационными расчетами [19-23].



Рисунок 6.6 – Функции распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов от параметра Z_q^{λ} : кривая 1 - $\Phi(Z_q^{\lambda})$ (для неупругого рассеяния электронов), кривая 2 - $J_{4el}(Z_q^{\lambda})$ (для упругого рассеяния электронов), кривая 3 - $J_4(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^4 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$ (для теплоемкости), штриховая кривая 4 определяется выражением $J_5(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^5 N_q^{\lambda} (N_q^{\lambda} + 1)$, полученным при расчете электросопротивления вариационным методом [20-22].



Рисунок 6.7 – Схема, иллюстрирующая (a) «вертикальные» $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}'_1 + \mathbf{q}_1$, (б) «горизонтальные» $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}'_2 + \mathbf{q}_2$ и (c) «косые» переходы $\mathbf{k}_3 \rightarrow \mathbf{k}'_3 + \mathbf{q}_3$.

6.5 Обсуждение результатов

Результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ хорошо согласуются с экспериментальными данными [179-180] (см. рисунок 6.8). Отметим, что вклады всех мод в электросопротивление следуют теории Блоха-Грюнайзена: при низких температурах $T << \theta_D^{\lambda}$ рассеяние электронов на фононах неупругое, и $\rho_{e-ph}^{\lambda}(T) \approx B_1^{\lambda}T^5$. В области высоких температур $T >> \theta_D^{\lambda}$ рассеяние электронов на фононах можно считать упругим [17-23], и все вклады следуют линейной зависимости от температуры:

$$\rho_{e-ph}(T) \approx B_2 T, \quad B_2 = \frac{(m_F)^2 k_B}{24\pi^3 \hbar^7 e^2 \rho n_e} \sum_{\lambda} \Phi_T^{\lambda}, \quad \Phi_T^{\lambda} = \left(\theta_D^{\lambda}\right)^4 \int_0^1 d\Omega_q \frac{\left(E_{eff}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^2}{\left\{S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right\}^6} = \left(\theta_D^{\lambda}\right)^4 B^{\lambda}, \quad (6.13)$$

$$\theta_D^{\lambda} = \frac{\hbar}{k_B} \left(\frac{9N}{4\pi V}\right)^{1/3} \left\{ \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \frac{1}{\left(S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^3} \right\}^{-1/3}.$$
(6.14)

Воспользуемся формулой (6.3) и представим функцию Φ_T^{λ} в виде:

$$\Phi_T^{\lambda} = 4\pi \left(\theta_D^{\lambda}\right)^4 \left\{ E_{0L}^2 \left\langle \frac{\left(\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n}\right)^2}{\left\{S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right\}^6} \right\rangle_{\Omega} + E_{0t}^2 \left\langle \frac{\left[\mathbf{e}^{\lambda} \mathbf{n}\right]^2}{\left\{S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right\}^6} \right\rangle_{\Omega} \right\}$$
(6.15)

В среднем отклонения рассчитанных значений от экспериментальных данных [179] для кристаллов Au, Ag и Cu не превышают 10-15% (см. рисунки 6.8 а, б, в). При этом для кристаллов



Рисунок 6.8 – Температурные зависимости электросопротивления: (а) - золото, (б) – серебро, (в) - медь - кривые 1, а также вкладов в него от продольных фононов - кривые 2, вкладов медленной t_2 -моды - кривые 3, вклад быстрой t_1 -моды - кривые 4. Символы – экспериментальные данные из работы [179]. Температурные зависимости относительных вкладов в электросопротивление: золото - (г), серебро - (д), медь - (е): кривая 1 - для продольных фононов, кривая 2 - для медленной t_2 -моды, кривая 3 - для сдвиговой компоненты t_2 -моды, кривая 4 - для быстрой t_1 -моды и кривая 5- для полного вклад квазипоперечных фононов.

210

Аи и Си во всём интервале температур доминирующий вклад в электросопротивление вносит медленная t2-мода, а расхождение с экспериментом в интервале 700-1000 К увеличивается до 15-30%, что, по-видимому, связано с рассеянием на термоактивированных дефектах. В отличие от золота и меди, для серебра только в интервале температур 10-120 К доминирующий вклад в электросопротивление вносит медленная t2-мода, а при более высоких температурах – продольные фононы. Расхождение с экспериментом для Ад в интервале 100-1000 К составляет 5-7%, в интервале 20-40 К – 7-20%, в интервале 50-100 К – 7-10% (см. рисунок 6.8). Следует отметить, что при учете рассеяния электронов только продольными компонентами колебательных мод В рамках теории деформационного потенциала [17-23] В высокотемпературной области (*T*>300 К) мы получили для электросопротивления БМ значения, в 4-5 раз меньшие экспериментальных данных [179]. В работах [177-178] температурные зависимости электросопротивления благородных металлов в низкотемпературной области при *T*< 300 К рассчитывали при учете рассеяния электронов на продольных компонентах колебательных мод в рамках теории деформационного потенциала. В этом подходе получены значения, существенно меньшие экспериментальных, для всех благородных металлов. Как видно из рисунка 6.9, расхождение результатов работ [177-178] с данными эксперимента при температурах *T*< 300 К превышает 200-300%.

Поэтому мы учли рассеяние электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных мод, и из согласования результатов расчета температурных зависимостей электросопротивления с экспериментальными данными при $T >> \theta_D$, где оно следует линейной зависимости $\rho \sim T$, получили значения E_{0t} для всех металлов (см. таблицу 6.5). При $T >> \theta_D$ вклад в электрон-фононную релаксацию вносят фононы всего спектра, однако в монографии Займана [21] показано, что в высокотемпературной области квантование энергии колебаний решетки не играет роли. В этом предельном случае электросопротивление пропорционально среднему квадрату тепловых колебаний атома, который пропорционален температуре [21]. Оно не зависит от особенностей спектра фононов, а кубическая симметрия кристаллов и упругие свойства учитываются через температуры Дебая для каждой из ветвей спектра (6.13), (6.14). Поэтому оценки E_{0t} , полученные для благородных металлов на основе этого предположения, можно считать вполне надежными. Хорошее согласие результатов расчета электросопротивления БМ в широком температурном интервале с экспериментальными данными [179] оправдывает это предположение (см. рисунки 6.8a, б, в). В высокотемпературном пределе из выражений (6.13) и (6.14) следует отношение вкладов в электросопротивление благородных металлов от фононов различных поляризаций:

$$\rho_{e-ph}^{t^2} : \rho_{e-ph}^{L} : \rho_{e-ph}^{t1} = \Phi_T^{t^2} : \Phi_T^{t1} : \Phi_T^{L}$$
(6.16)



Рисунок 6.9 – Результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления меди (a), серебра (b) и золота (c), символы – экспериментальные данные. Рисунок взят из работы [177].

Для кристаллов Au, Ag и Cu отношения (6.12) и (6.16) приведены в таблице 6.6. Отметим, что оценки для высокотемпературного предела выполнены при $T >> \theta_D^{\lambda}$. Однако сравнение с экспериментом приведены в этом пределе при T=1000 К. Поэтому оценки вкладов медленной t_2 моды и продольных фононов в высокотемпературных пределах могут изменяться на 1-2% в зависимости от выбранной асимптотики. Как видно из таблицы 6.6, соотношения вкладов при переходе в высокотемпературную область $T >> \theta_D^{\lambda}$, где электросопротивление следует линейной температурной зависимости, достаточно резко изменяются. Вклад медленной t_2 -моды уменьшается, а относительный вклад продольных фононов возрастает. Наиболее резкое изменение соотношения вкладов имеет место для серебра, для которого в высокотемпературном пределе вклад продольных фононов возрастает от 3% почти до 53%.

 Таблица
 6.6
 –
 Относительный
 вклад
 в

 электросопротивление
 для
 фононов
 различных

 поляризаций

 $T << \Theta_D^{\lambda}$, $B_1^{t2} : B_1^{t1} : B_1^L$ $T >> \Theta_D^{\lambda}$, $\Phi_T^{t2} : \Phi_T^{t1} : \Phi_T^L$

	$T \ll \Theta_D^{\lambda}, \ B_1^{t2} : B_1^{t1} : B_1^L$	$T >> \Theta_D^{\lambda}, \ \Phi_T^{t2}: \Phi_T^{t1}: \Phi_T^L$
Au	0.845:015:0.005	0.48:0.26:0.26
Ag	0.84:013:0.03	0.34:0.13:0.53
Cu	0.86:013:0.02	0.46:0.22:0.32

Следует отметить интересную особенность полученных результатов: вклады всех мод в электросопротивление как при низких температурах $T << \theta_D^\lambda$ различны, но имеют одинаковую зависимость от температуры $\rho_{e-ph}^{\lambda}(T) \approx B_{1}^{\lambda}T^{5}$, тогда так при $T >> \theta_{D}^{\lambda}$ они различны для различных мод, но имеют линейную зависимость от температуры $\rho_{e^{-ph}}^{\lambda}(T) \approx B_2^{\lambda} \cdot T$. Поэтому из рисунка 6.8 видно, что их относительные вклады выходят на постоянное значение. Нетрудно убедиться, что в высокотемпературном пределе доминирующая роль квазипоперечных фононов в электросопротивлении благородных металлов сохраняется. Их суммарный вклад в электросопротивление кристаллов Au, Ag и Cu при температуре T=1000 К составляет 73, 47 и 68%, соответственно. Как видно из рисунка 6.8, кривые 3, во всей исследованной области температур доминирующий вклад в электрон-фононную релаксацию благородных металлов вносит медленная поперечная мода. Её доминирующая роль в электросопротивлении имеет простое физическое объяснение. Вклад различных колебательных мод в электрон-фононную релаксацию определяется усредненной величиной угла между падающим и рассеянным электроном, который пропорционален импульсу фонона (см. рисунок 6.1). Поэтому чем больше импульс наиболее актуальных фононов при фиксированной энергии, тем больше их вклад в электросопротивление. Так, например, в направлении [011] для одной и той же энергии фононов

волновые векторы t2-моды для кристаллов Au, Ag и Cu будут больше, чем для продольных фононов, в 3.8, 3.1 и 3.1 раза, соответственно. Из рисунка 6.1 следует, что медленная t2-мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор фиксированном значении энергии фонона, вносит при максимальный вклад в электросопротивление благородных металлов (рис.6.8). Отношения средних значений квадратов эффективных констант связи $\langle \left(E_{eff}^{L}(\theta, \varphi) \right)^{2} \rangle / \langle \left(E_{eff}^{\prime 2}(\theta, \varphi) \right)^{2} \rangle$ для кристаллов Au, Ag и Cu равно 6, 10 и 4.8, соответственно. Однако из формул (6.8) и (6.15) видно, что угловые коэффициенты B_{Ω}^{λ} и Φ_{T}^{λ} обратно пропорциональны шестой степени фазовой скорости фононов, и это играет решающую роль в доминирующей роли t2-моды в электрон-фононной релаксации. Следует отметить, что релаксация электронов на сдвиговой компоненте медленной t2-моды в меди обеспечивает 83%, тогда как продольная компонента t2-моды дает всего лишь 3%.

Рассмотрим применимость теории Блоха-Грюнайзена [16-23] к расчету электросопротивления благородных металлов. В ней предполагается, что весь неравновесный импульс, переданный фононам за счет нормальных процессов электрон-фононного рассеяния, релаксирует внутри подсистемы фононов. Основным механизмом релаксации импульса фононов при достаточно высоких температурах являются процессы фонон-фононного переброса. Они активируются при температурах порядка $\theta_D^{\lambda}/\gamma$, где γ ~(2-3) [30]. Поскольку для кристаллов Au,

Ад и Си величина θ_D находится в интервале от 170 до 343 К (а для медленной t_2 -моды $\theta_D^{t^2}$ – в интервале от 134 К до 271 К), то процессы переброса могут обеспечить равновесие системы фононов и согласие расчетов с экспериментом при T> 80-100 К. Поэтому неудивительно, что температурные зависимости электросопротивления БМ, рассчитанные в рамках теории Блоха-Грюнайзена, достаточно хорошо согласуются с данными эксперимента [179] в этом в интервале (см. рисунок 6.8а). Для согласия результатов расчета с экспериментом в интервале от 10 до 100 К необходимо, чтобы, во-первых, нормальные процессы электрон-фононного рассеяния преобладали над процессами электрон-фононного переброса. Во-вторых, резистивные процессы рассеяния фононов, такие как рассеяние фононов на изотопическом беспорядке и в процессах фонон-электронного переброса, должны обеспечить равновесие фононной системы. Выполнение первого условия может быть обусловлено особенностями поверхности Ферми благородных металлов. Расчёты поверхности Ферми при использовании различных приближений [183-186] показали, что её отклонение от изотропного приближения мало и в среднем составляет менее 10%. Общая площадь восьми шеек, в которых поверхность Ферми касается границы зоны Бриллюэна, составляет от 4% до 8% (см. таблицу 6.2). Процессы электрон-фононного переброса ограничены областями шеек на границах зон Бриллюэна, близкими к направлениям [111]. Их

суммарная площадь на порядок величины меньше полной поверхности Ферми, поэтому нормальные процессы рассеяния должны преобладать над процессами переброса. Этот вопрос требует дополнительного анализа с учетом реальной формы поверхности Ферми. Суммарный объём конусов пустых состояний, которые опираются на области шеек между зонами Бриллюэна, мал по сравнению с полным объёмом сферы Ферми и составляет от 4% до 9% (см. таблицу 6.2). Эти состояния перераспределяются выше штриховой линии на рисунке 6.5 и обуславливают плавные локальные максимумы в окрестности направлений типа [100]. Поэтому отклонение поверхности Ферми от сферы для благородных металлов малы [183-186].

Следует отметить, что наличие перемычек между соседними поверхностями Ферми в благородных металлах делает их открытыми. Поэтому процессы электрон-фононного и фононэлектронного переброса при столкновении электрона с тепловым фононом могут происходить при любой температуре, т.е. не являются термоактивированными, в отличие от щелочных металлов. В работах [132-133, 187-188] проанализировано электросопротивление металлов с открытыми поверхностями Ферми в одномодовой, изотропной модели для фононов. Авторы сделали вывод, что при низких температурах $T << \theta_D$ электронная система жестко привязана к фононной (имеет место полное взаимное увлечение электронов и фононов), поэтому закон Блоха-Грюнайзена $\mathcal{A}_{-ph}(T) \approx B_1 T^5$ должен выполняться при любой сколько угодно малой температуре. Предположение авторов относительно полного взаимного увлечения электронов и фононов в благородных металлах требует дополнительного анализа, хотя процессы фононэлектронов и веторов относительно полного взаимного увлечения электронов и фононов в благородных металлах требует дополнительного анализа, хотя процессы фононэлектронов и веторов в металлах с открытыми поверхностями Ферми содействуют установлению равновесия в фононной подсистеме и, соответственно, реализации закона Блоха-Грюнайзена $\mathcal{P}_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5$.

Однако предположение авторов [187-188] о том, что процессы электрон-фононного рассеяния можно считать упругими, является некорректным. Тепловой импульс фонона гораздо меньше характерных размеров поверхности Ферми, но это неравенство не имеет отношения к критерию учета или пренебрежения неупругостью электрон-фононного рассеяния, как это было показано нами в работах [51, 53]. Дело в том, что параметром неупругости электрон-фононного рассеяния является величина $Z_q^{i} = \hbar \omega_q^{i} / (k_B T)$, которую нужно сравнивать не с безразмерной энергией Ферми $\varepsilon_F / k_B T$, а с величиной $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T)$. Для электронов на уровне Ферми $y_k = 0$, а в пределах теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \leq 1$. Релаксация импульса электронов обеспечивается всеми термически активированными фононами, а максимальный вклад в электросопротивление вносят фононы с наибольшим волновым вектором, допускаемым функцией Планка. Нами показано, что функции распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов лежит в интервале $1 \leq (\hbar \omega_q^3 / k_B T) \leq 12$, а максимум её приходится на

 $(\hbar \omega_q^{\lambda} / k_B T) \approx 5$. Поэтому пренебрегать неупругостью электрон-фононного рассеяния в условиях, когда энергия неупругости на порядок величины превышает энергию теплового размытия энергии Ферми, является некорректным приближением.

Что касается второго вопроса об установления равновесия в фононной системе, то для его решения необходимо проанализировать релаксацию импульса фононов в неравновесной электрон-фононной системе при рассеянии фононов на изотопическом беспорядке и в процессах фонон-электронного переброса. Очевидно, для решения этой проблемы необходимо исследовать влияние фокусировки фононов на взаимный обмен импульсами между электронным и тремя фононными потоками, соответствующими трем ветвям колебательного спектра фононов. При этом следует учесть, что резистивные процессы электрон-фононного переброса в благородных металлах не вымораживаются и могут происходить при любой температуре. Они приводят к увеличению электросопротивления. С другой стороны, взаимное увлечение электронов и фононов приводит к обратной передаче неравновесного импульса электронам и, соответственно, к уменьшению электросопротивления. Поэтому эти эффекты могут привести к взаимной компенсации друг друга. Актуальной проблемой для электронного транспорта в БМ является также анализ резистивных процессов фонон-электронного переброса, которые приводят к релаксации неравновесного импульса в подсистеме фононов и способствуют установлению равновесия в фононной системе. Уменьшая обратную передачу неравновесного импульса от фононов к электронам, эти процессы приводят к увеличению электросопротивления благородных металлов и способствуют выполнению основного предположения теории Блоха-Грюнайзена при низких температурах. Эти процессы ограничены главным образом областями 8 шеек между соседними областями поверхности Ферми, поэтому для их анализа необходим аналитический расчет поверхности Ферми или по крайней мере пришеечных участков ПФ.

Решение этих задач, а также анализ процессов электрон-фононного переброса с участием квазипоперечных и квазипродольных мод с учетом фокусировки фононов в благородных металлах представляет самостоятельную проблему, требующую отдельного рассмотрения.

6.6 Выводы

1. Из согласования результатов расчета с экспериментальными данными при высоких температурах ($T >> q_D$), где электросопротивление следует линейной зависимости, определены константы E_{0t} , характеризующие взаимодействие электронов со сдвиговыми компонентами колебательных мод БМ. Это определение основано на анализе Займана [21], который показал, что в данной области температур квантование энергии колебаний решетки не играет роли. В этом
случае электросопротивление не зависит от деталей спектра фононов, а пропорционально среднему квадрату амплитуды тепловых колебаний атома, и, соответственно, температуре. Вторым обстоятельством, которое позволяет определить константы E_{0t} для БМ, является различный тип взаимодействия электронов с продольными и поперечными компонентами колебательных мод: взаимодействие электронов с продольными компонентами обусловлено деформациями сжатия и растяжения и описывается потенциальным полем, тогда как расссеяние электронов на сдвиговых волнах – вихревым полем [6]. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют [6, A14]. Вследствие этого они входят в матричный элемент электрон-фононного взаимодействия аддитивным образом [A14] и их вклады в электросопротивление при $T >> q_D$ могут быть легко определены.

2. Учет влияния упругой анизотропии на спектр и векторы поляризации фононов, а также релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных мод, позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К.

3. Показано, что при низких температурах $T < q_D$ квазипоперечные фононы вносят доминирующий вклад в электросопротивление благородных металлов. Их вклад в электронфононную релаксацию кристаллов Аи, Ад и Си обеспечивает 99.5, 97 и 98% полного электросопротивления, соответственно. В то же время на продольные фононы остается менее температурах 3%. При высоких ОН превышает вклад продольных фононов В электросопротивление кристаллов Au и Cu в 2.7 и 2.1 раза, соответственно. Для кристаллов Ag при T>120 К вклад продольных фононов становится больше суммарного вклада квазипоперечных мод, а при T= 1000 K он превышает суммарный вклад квазипоперечных фононов в 1.3 раза.

4. Дано физическое объяснение доминирующей роли квазипоперечных мод в электросопротивление БМ при низких температурах. Из анализа и сравнения изоэнергетических поверхностей колебательных мод и их вкладов в электрон-фононную релаксацию было показано, что электросопротивление БМ при низких температурах обратно пропорционально шестой степени фазовой скорости фононов, поэтому квазипоперечные фононы, имеющие минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированном значении энергии фонона, вносят максимальный вклад в электросопротивление БМ. Поэтому не удивительно, что вклад медленной *t*₂-моды, имеющей минимальную фазовую скорость, в электросопротивление БМ превышает 80%.

Основные результаты, приведенные в Главе 6, опубликованы в работах [А20, А24, А27].

217

Заключение

В диссертационной работе развито новое направление исследований влияния анизотропии упругой энергии на фокусировку фононов, электронный и фононный транспорт в металлических и диэлектрических кристаллах и наноструктурах на их основе:

1. Анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах показал, что в соответствии со знаком безразмерного параметра анизотропии k-1 все кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной k-1>0 (тип I) и отрицательной k-1<0 (тип II) анизотропией упругой энергии. Для кристаллов одного типа направления фокусировки и дефокусировки колебательных мод совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направления дефокусировки в кристаллах второго типа. Проанализировано влияние фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний (ПФС). Показано, что в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения ПФС достигаются в областях фокусировки, а минимальные - в областях дефокусировки фононов. Поэтому направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки и области углов, соответствующие фокусировке и дефокусировке фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии.

2. Разработан теплопроводности метод расчета упруго анизотропных монокристаллических образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением, учитывающий фокусировку фононов. Показано, что в образцах с круглым и квадратным сечением коэффициент теплопроводности зависит от одного ориентационного параметра – направления теплового потока относительно кристаллографических осей. В образцах с прямоугольным сечением или пленках он зависит уже от двух ориентационных параметров: от направления теплового потока и от ориентации широкой грани образца или плоскости пленки. Дана физическая интерпретация эффектов МакКарди в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии. Показано, что первый эффект МакКарди в образцах с квадратным сечением обусловлен фокусировкой медленной t_2 -моды в кристаллах обоих типов. Причем в кристаллах первого типа с k-1>0 (типа Si) её фокусировка и максимум теплопроводности достигается в направлениях [001], тогда как в кристаллах второго типа с k-1<0 (типа CaF₂) фокусировка медленной t₂-моды и максимум теплопроводности достигается В направлении [111], соответствующем минимуму теплопроводности в кристаллах первого типа. Исследование влияния фокусировки на распространение упругих волн и теплопроводность образцов с прямоугольным сечением в направлении [011] и различной ориентацией широких граней показало, что второй эффект МакКарди обусловлен фокусировкой быстрой t_1 -моды в кристаллах обоих типов и доминирующей ролью рассеяния фононов на широких гранях образца. Показано, что в кристаллах первого типа с k-1>0 (типа Si) теплопроводность в направлении [011] для образцов с широкой гранью {001} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {110}, тогда как в кристаллах второго типа с k-1<0 (типа CaF₂) — наоборот: теплопроводность для образцов с широкой гранью {011} будет больше, чем для образцов с широкой гранью {100}.

3. Исследована анизотропия теплопроводности нанопроводов и нанопленок на основе диэлектрических и полупроводниковых кристаллов, а также материалов спинтроники в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Проанализировано влияние фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs при низких температурах. Определены параметры зеркальности отражения фононов от границ гетероструктур. Рассчитаны угловые зависимости длин свободного пробега фононов, определяющих теплопроводность гетероструктур с ориентациями плоскостей {100} и {110}. Показано, что гетероструктуры с ориентацией {100} имеют малую анизотропию теплопроводности и значительно большие значения, чем с ориентацией {110}. При этом квазипоперечные фононы обеспечивают от 80 до 93% теплопереноса в гетероструктурах. Анализ распространения фононов в квадратных пленках с ориентациями {100} и {111} показал, что для произвольного направления потока тепла область усреднения по углам захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому для них длины пробега фононов и теплопроводность становятся изотропными в плоскости пленок. Их анизотропия полностью определяется ориентацией плоскости пленки. Тогда как в квадратных пленках с ориентацией {110} угол между направлениями фокусировки и дефокусировки фононов увеличивается в два раза относительно пленок с ориентациями {100} и {111}. Поэтому для произвольного направления потока тепла при усреднении по углам в плоскости пленок оба направления не могут быть одновременно охвачены. В связи с этим длины пробега и теплопроводность в плоскости пленки с {110} становятся анизотропными.

4. Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и роль сдвиговых волн в термоэдс увлечения и электросопротивлении кристаллов калия. Из сопоставления результатов расчета термоэдс и решёточной теплопроводности кристаллов калия с различной концентрацией дислокаций при низких температурах с экспериментальными данными [158] определена константа связи электронов со сдвиговыми волнами. Учет этого механизма релаксации позволил согласовать температурные зависимости термоэдс калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными [158] в интервале температурные зависимости термоэдс калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными [158] в интервале температур 1-3 К. Показано, что вклады медленных квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия, которые ранее не учитывали, при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T << \theta_D$, на порядок величины превышают вклад продольных фононов. Их вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление калия

составляет 92%, тогда как на продольные фононы остается 8%. При этом релаксация на компоненте продольной квазипоперечной обеспечивает 58% медленной моды электросопротивления, тогда как сдвиговая компонента – 32%, что в 4 раза больше вклада продольных фононов. Однако при высоких температурах ($T >> \theta_D$), где сопротивление следует линейной зависимости $\rho_{e-ph}(T) \approx B_2 T$, вклад продольных фононов в электросопротивление оказывается в 4 раза больше, чем вклад квазипоперечных фононов. Дано физическое объяснение медленной квазипоперечной доминирующей роли моды В термоэдс увлечения И электросопротивлении кристаллов калия при низких температурах. Из анализа изоэнергетических поверхностей колебательных мод и их вкладов в электрон-фононную релаксацию показано, что медленная поперечная мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированном значении энергии фонона, вносит максимальный вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия.

5. В рамках феноменологического метода Казимира-МакКарди исследовано влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах. Показано, что в режиме кнудсеновского течения фононного газа медленная t_2 -мода вносит преобладающий вклад в термоэдс увлечения наноструктур, и только в направлениях, близких к направлению фокусировки *L*-фононов, их вклад становится сравнимым с вкладом *t*₂-моды. В наноструктурах калия с поперечными размерами *D*<5·10⁻⁶ см реализуется режим кнудсеновского течения фононного газа. В этом случае термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность нанопроводов и нанопленок анизотропны и следуют зависимостям: $\alpha_{drag}(T) \approx B_2 T^4$ и $\kappa(T) \approx CT^3$. В образцах калия с поперечными размерами $D > 10^{-2}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации фононов – рассеяние на электронах и дислокациях. Термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность изотропны и следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \approx AT^3$ и $\kappa(T) \approx BT^2$. При низких температурах анизотропия термоэдс увлечения в наноструктурах калия обусловлена конкуренцией вкладов медленной t2-моды, которые обеспечивают максимальные значения термоэдс в направлении [100], и продольных фононов, которые обеспечивают минимальные значения термоэдс в направлении [111]. С увеличением сечения образца благодаря более сильному рассеянию L-фононов на электронах анизотропия термоэдс увлечения в наноструктурах изменяется немонотонным образом: при переходе от режима кнудсеновского течения фононного газа она сначала возрастает, достигает максимума, а затем уменьшается до нуля при переходе к режиму объёмных механизмов релаксации. Показано, что сдвиговые волны вносят значительный вклад в термоэдс увлечения наноструктур. По порядку величины он совпадает с вкладом *L*-фононов, а в некоторых направлениях превосходит его. Сдвиговые волны

оказывают значительное влияние на соотношение вкладов *t*₂-моды и *L*-фононов, а также на анизотропию термоэдс увлечения.

6. Исследовано влияние упругой анизотропии и фокусировки фононов на электронный транспорт в монокристаллах калия и благородных металлов (БМ). Ранее в теории явлений электронного переноса в металлах для фононов использовали модель изотропной среды, в которой учитывали релаксацию электронов только на продольных фононах. Нами показано, что квазипоперечные фононы, имеющие значительно больший волновой вектор при фиксированной энергии фонона, вносят значительно больший вклад в электрон-фононную релаксацию, термоэдс увлечения и электросопротивление щелочных и благородных металлов, чем продольные фононы. Их вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление калия составил 92%, тогда как для электросопротивления БМ он превышает 97%. При низких температурах T<< θ_D вклад квазипоперечных мод в электросопротивление Au, Ag, Cu составляет 99.5, 97, 98%, соответственно. Тогда как вклад продольных фононов оказался менее 3%. Определена константа, характеризующая взаимодействие электронов со сдвиговыми волнами, и проанализирована их роль в электросопротивлении БМ. Показано, что релаксация электронов на сдвиговых волнах, которая ранее не учитывалась, вносит доминирующий вклад в удельное электросопротивление БМ в диапазоне температур от 10 до 1000 К. При температурах значительно ниже температуры Дебая этот вклад составляет 95, 91 и 95% удельного электросопротивления для кристаллов Аu, Ад и Си, соответственно, а при T = 1000 К уменьшается до 73, 44 и 66 %. Учет релаксации электронов на сдвиговых компонентах квазипоперечных фононов позволил количественно согласовать результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления БМ с данными эксперимента в температурном интервале от 10 до 1000 К без использования подгоночных параметров.

Публикации автора

- А1.Кулеев, И. Г. Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. Текст: непосредственный // ФТТ. 2007. Т. 49. С. 422-429.
- А2.Фокусировка фононов и электрон-фононное увлечение в полупроводниковых кристаллах с вырожденной статистикой носителей тока / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2016. – Т. 150. – С. 567-585.
- АЗ.Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопроводах из материалов спинтроники / И. И. Кулеев, С. М.

Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2017. – Т. 118. – С. 12-22.

- А4.Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопленках из материалов спинтроники / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2017. – Т. 118. – С. 332-344.
- А5.Кулеев, И. И. Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при низких температурах / И. И. Кулеев. Текст: непосредственный // ФТТ. 2017. Т. 59. С. 668-679.
- A6. The influence of phonon focusing on density of states and the Knudsen phonon gas flow in nanowires with different types of anisotropy of elastic energy / I. I. Kuleyev, S. M. Bakharev, I. G. Kuleyev, V. V. Ustinov. Текст: непосредственный // Physica Status Solidi C. 2017. V. 14. P. 1600263-1600273.
- А7.Кулеев, И. И. Влияние фокусировки на распространение фононов и теплопроводность в монокристаллических пленках с различным типом анизотропии упругой энергии / И. И. Кулеев // ФТТ. – 2018. – Т. 60. – С. 868-874.
- А8.Кулеев, И. Г. Эффекты МакКарди в теплопроводности упруго анизотропных кристаллов в режиме кнудсеновского течения фононного газа / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев. Текст: непосредственный // ФТП. 2018. Т. 52. С. 1543-1552.
- А9.Кулеев, И. И. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность гетероструктур GaAs/AlGaAs при низких температурах / И. И. Кулеев. Текст: непосредственный // ФТТ. 2019. Т. 61. С. 426-433.
- А10. Кулеев, И. И. Фокусировка фононов и анизотропия решеточной теплопроводности кристаллов калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2018. – Т. 119. – С. 1203-1209.
- А11. Кулеев, И. И. Роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения кристаллов калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2019. – Т. 156. – С. 56-71.
- A12. Kuleyev, I. I. Drag thermopower in nanowires and bulk potassium crystals under the conditions of competition between the boundary and bulk mechanisms of phonon relaxation / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. Текст: непосредственный // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. V. 31. P. 375701-375713.
- А13. Кулеев, И. И. Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и температурные зависимости термоэдс в кристаллах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2019. – Т. 120. – С. 1129-1135.

- А14. Кулеев, И. И. Роль сдвиговых волн в электрон-фононном увлечении в кристаллах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2020. – Т. 121. – С. 1011-1018.
- A15. Kuleyev, I. G. The effect of phonon focusing on the electron-phonon relaxation and electron transport in potassium crystals / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev. Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. 2020. V. 68. P. 886-895.
- А16. Кулеев, И. И. Влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических нанопроводах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2021. – Т. 122. – С. 83-90.
- A17. Kuleyev, I. G. Effect of phonon focusing and shear waves on anisotropy of drag thermopower in potassium nanoplates / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev. Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. 2021. V. 72. P. 351-359.
- A18. Kuleyev, I. I. Phonon focusing and anisotropy of drag thermopower in potassium nanofilms at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. Текст: непосредственный // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2022. V. 170. P. 110948-110957.
- А19. Кулеев, И. Г. Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. Текст: непосредственный // ФТТ. 2022. Т. 64. С. 899-908.
- A20. Kuleyev, I. G. The role of shear waves in electron-phonon relaxation and electrical resistivity of noble metals / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev. Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. 2023. V. 83. P. 103-112.
- A21. Kuleyev, I. I. Dynamic Properties and Focusing of Phonons in Metallic and Dielectric Crystals of Cubic Symmetry. Review 1 / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). 2023. V. 124. P. 1-30.
- A22. Kuleyev, I. I. Phonon Focusing and Electron Transport in Potassium Single Crystals. Review 2 / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). 2023. V. 124. P. 31-58.
- A23. Kuleyev, I. I. Effect of Phonon Focusing and Shear Waves on Drag Thermopower in Potassium Single-Crystal Nanostructures at Low Temperatures. Review 3 / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). 2023. V. 124. P. 59-85.
- A24. Kuleyev, I. I. Effect of Anisotropy of Elastic Energy and Shear Waves on Electron–Phonon Relaxation and Electrical Resistivity of Noble Metals. Review 4 / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). – 2023. – V. 124. – P. 86-105.

- А25. фокусировка фононов и фононный транспорт в монокристаллических наноструктурах / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, В.В. Устинов. – Екатеринбург: «Издательство УМЦ УПИ», 2018. – 256 с. – Библиогр.: с. 243-251. – 300 экз. – ISBN 978-5-8295-0562-2. – Текст: непосредственный.
- A26. Phonon focusing and phonon transport in single-crystal nanostructures/ I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev,
 S.M. Bakharev, V.V. Ustinov. DeGruyter, 2020. 210 р. Библиогр.: с.202-208. ISBN 978-3-11-067039-4. – Текст: непосредственный.
- А27. Кулеев, И.Г. Роль квазипоперечных фононов и упругой анизотропии в термоэлектрических эффектах и электросопротивлении щелочных и благородных металлах» // И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. Екатеринбург: «Издательство УМЦ УПИ», 2023. 205 с. Библиогр.: с. 192-200. 300 экз. ISBN 978-5-8295-0882-1. Текст: непосредственный.

Список литературы

Nanoscale thermal transport / D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majumdar,
 H. J. Maris, R. Merlin, S. R. Phillpot. – Текст: непосредственный // J. Appl. Phys. – 2003. – V. 93. –
 № 2. – Р. 793–818.

2. McConnell, A. D. Nanoscale thermal transport / A. D. McConnell, K. E. Goodson. – Текст: непосредственный // Ann. Rev. on Heat Transfer. – 2005. – V. 14. – P. 129-168.

3. Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 / D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen, D. R. Clarke, S. Fan, K. E. Goodson, P. Keblinski, W. P. King, G. D. Mahan, A. Majumdar, H. J. Maris, S. R. Phillpot, E. Pop, L. Shi. – Текст: непосредственный // Applied Physics Reviews. – 2014. – V. 1. – № 1. – P. 011305.

4. Majumdar A. Thermal conductivity of individual silicon nanowires / D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang. – Текст: непосредственный // Applied Physics Letters. – 2003. – V. 83. – P. 2934-2936.

5. Liu, W. Phonon-boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers/ W. Liu, M. Asheghi. – Текст: непосредственный // Applied Physics Letters. – 2004. – V. 84. – P. 3819-3821.

6. Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates /

M. Asheghi, M. N. Touzelbaev, K. E. Goodson, Y. K. Leung, S. S. Wong. – Текст: непосредственный // Journal of Heat Transfer. – 1998. – V. 120. – Р. 30-36.

7. Asheghi, M. Phonon-boundary scattering in thin silicon layers / M. Asheghi, Y. K. Leung, S. S. Wong, K. E. Goodson. – Текст: непосредственный // Applied Physics Letters. – 1997. – V. 71. – P. 1798-1800.

8. Casimir, H. B. G. Note on the conduction of heat in crystals / H. B. G. Casimir. – Текст: непосредственный // Physica. – 1938. – V. 5. – Р. 495-500.

9. Knudsen, M. Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren / M. Knudsen. – Текст: непосредственный // Annalen der Physik. – 1909. – V. 333. – № 1. – Р. 75–130.

10. Berman, R. The Thermal Conductivity of Diamond at Low Temperatures / R. Berman, F. E. Simon, J. M. Ziman. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. – 1953. – V. A 220. – P. 171–183.

11. Berman, R. Thermal Conduction in Artificial Sapphire Crystals at Low Temperatures. I. Nearly Perfect Crystals / R. Berman, E. L. Foster, J. M. Ziman. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. – 1955. – V. A 231. – P. 130–144.

12. Taylor, B. Phonon focusing in solids / B. Taylor, H. J. Maris, C. Elbaum. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. Letter. – 1969. – V. 23. – P. 416–419.

13. Maris, H. J. Enhancement of heat pulses in crystals due to elastic anisotropy / H. J. Maris. – Текст: непосредственный // J. Acoust. Soc. Am. – 1971. – V. 50. – Р. 812–818.

14. Wolfe, J. P. Imaging Phonons: Acoustic Wave Propagation in Solids / J. P.Wolfe. – Cambridge University Press, New York. 1998. – 411 р. – ISBN 9780521620611. – Текст: непосредственный.

15. McCurdy, A. K. Anisotropic heat conduction in cubic crystals in the boundary scattering regime /

A. K. McCurdy, H. J. Maris, C. Elbaum. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1970. – V. 2. – P. 4077–4083.

16. Peierls, R.E. Quantum Theory of Solids / R. E. Peierls. – Oxford at clarendon press. 1955. – 238 р. – Текст: непосредственный.

17. Bloch, F. Zum elektrischen Widerstandsgesetz bei tiefen Temperaturen / F. Bloch. – Текст: непосредственный // Zs. Fur Phys. – 1930. – V.59. – P.208–214.

 Gruneisen, E. Die Änderung des Druckkoeffizienten des metallischen Widerstands mit der Temperatur / E. Gruneisen. – Текст: непосредственный // Ann. der Phys. – 1941. – V.40. – P.543–552.
 Sommerfeld, A. Elektronentheorie der Mettale / A. Sommerfeld, H. Bete. – Handbuch der Physik, Bd. 24/2. 1934. – 298 p. – Текст: непосредственный.

20. Wilson, A.H. The Theory of Metals / A. H. Wilson. – Cambridge University Press. 1953. – 354 р. – Текст: непосредственный.

21. Ziman, J. Electrons and Phonons / J. Ziman. – Oxford University Press, New York. 1960. – 568 р. – Текст: непосредственный.

22. Blatt, F. J. Physics of electron conductivity in solids / F. J. Blatt. – McGRAW-HILL. 1968. – 446 р. – Текст: непосредственный.

23. Ziman J. Principles of the theory of solids / J. Ziman. – Cambridge University Press. 1972. – 448 р.
– Текст: непосредственный.

Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф. И. Федоров. – Наука, Москва. 1965 –
 384 с. – Текст: непосредственный.

25. Truel, B. Ultrasonic methods in solid state physics / B. Truel, C. Elbaum, B. B. Chick. – Academic Press, N. Y.–London, 1969. – 360 р. – Текст: непосредственный.

 Лейбфрид, Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов / Г. Лейбфрид. – Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963.
 – 312 с. – Текст: непосредственный.

27. Киттель, Ч. Введение в физику твёрдого тела / Ч. Киттель. – Москва: Наука, 1978. – 792 с. – Библиогр.: с. 770-791. – 40000 экз. – Текст: непосредственный.

28. Такер, Дж. Гиперзвук в физике твердого тела / Дж. Такер, В. Рэмптон. – Москва: Мир, 1975. – 454 с. – Библиогр.: с. 415-453. – Текст: непосредственный.

29. Гуревич, В. Л. Кинетика фононных систем / В. Л. Гуревич. – Москва:Наука, 1980. – 400 с. – 3000 экз. – Текст: непосредственный.

30. Берман, Р. Теплопроводность твёрдых тел / Р. Берман. – Москва: Мир, 1979. – 286 с. – Библиогр.: с. 268-276. – 5700 экз. – Текст: непосредственный.

Могилевский, Б. М. Теплопроводность полупроводников / Б. М. Могилевский, А. Ф.
 Чудновский. – М.: Наука, 1972. – 536 с. – Библиогр.: с. 514-536. – 5600 экз. – Текст: непосредственный.

32. Fuchs, K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals / K. Fuchs. – Текст: непосредственный // Proc. Cambridge Philos. Soc. – 1938. – V.34. – P.100–108.

33. Maris, H. J. Heat flow in nanostructures in the Casimir regime / H. J. Maris, S. Tamura. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 2012. – V.85. – №.5. – Р.054304.

34. Every, A. G. Formation of phonon-focusing caustics in crystals / A. G. Every. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1986. – V. 34. – №. 4. – Р.2852-2862.

35. Кулеев, И. Г. Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2007. – V. 49. – Р. 422-429.

36. Времена релаксации и длины свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния для монокристаллов кремния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2013. – V. 55. – Р. 24-35.

37. Features of phonon transport in silicon rods and thin plates in the boundary scattering regime. The effect of phonon focusing at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, A. V. Inyushkin. – Текст: непосредственный // Physica B. – 2013. – V. 416. – P. 81-87

 Phonon focusing and phonon transport in single-crystal nanostructures/ I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev,
 S.M. Bakharev, V.V. Ustinov. – DeGruyter, 2020. – 210 р. – Библиогр.: с.202-208. – ISBN 978-3-11-067039-4. – Текст: непосредственный.

39. Effect of phonon focusing on the temperature dependence of thermal conductivity of silicon / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, A. V. Inyushkin. – Текст: непосредственный // Physica Status Solidi B. – 2014. – V. 251. – P. 991-1000.

40. Kuleyev, I. I. Phonon focusing and features of phonon transport in the silicon nanofilms and nanowires at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev. – Текст: непосредственный // Physica Status Solidi B. – 2015. – V. 252. – P. 323-332.

41. Кулеев, И. Г. Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И. Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С. М. Бахарев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2014. – V. 145. – Р. 292-305

42. Кулеев, И. И. Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2015. – Т. 147. – №4. – С. 736-749.

43. Кулеев, И. И. Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических пленках Ge, Si, алмаза при низких температурах / И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2017. – Т. 59. – С. 668-679.

44. Кулеев, И. Г. Коэффициенты усиления потока фононов в кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии / И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2018. – Т.60. – Р.1260-1269.

45. Кулеев, И. И. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность гетероструктур GaAs/AlGaAs при низких температурах / И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2019.
− Т. 61. – С. 426-433.

46. Кулеев, И. И. Фокусировка фононов и анизотропия решеточной теплопроводности кристаллов калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2018. – Т. 119. – С. 1203-1209.

47. Кулеев, И. И. Роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения кристаллов калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2019. – Т. 156. – С. 56-71.

48. Kuleyev, I. I. Drag thermopower in nanowires and bulk potassium crystals under the conditions of competition between the boundary and bulk mechanisms of phonon relaxation / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. — Текст: непосредственный // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2019. – V. 31. – P. 375701-375713.

49. Кулеев, И. И. Влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и температурные зависимости термоэдс в кристаллах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2019. – Т. 120. – С. 1129-1135.

50. Кулеев, И. И. Роль сдвиговых волн в электрон-фононном увлечении в кристаллах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2020. – Т. 121. – С. 1011-1018.

51. Kuleyev, I. G. The effect of phonon focusing on the electron-phonon relaxation and electron transport in potassium crystals / I.G. Kuleyev, I.I. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. – 2020. – V. 68. – P. 886-895.

52. Кулеев, И. Г. Влияние фокусировки на взаимное увлечение электронов и фононов и электросопротивление кристаллов калия. – Текст: непосредственный / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. // ФТТ. – 2022. – Т. 64. – С. 899-908.

53. Kuleyev, I. G. The role of shear waves in electron-phonon relaxation and electrical resistivity of noble metals / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev. — Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. – 2023. – V. 83. – P. 103-112.

54. Кулеев, И. И. Влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических нанопроводах калия при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2021. – Т. 122. – С. 83-90.

55. Kuleyev, I. G. Effect of phonon focusing and shear waves on anisotropy of drag thermopower in potassium nanoplates / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Chinese Journal of Physics. – 2021. – V. 72. – P. 351-359.

56. Kuleyev, I. I. Phonon focusing and anisotropy of drag thermopower in potassium nanofilms at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. — Текст: непосредственный // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2022. – V. 170. – P. 110948-110957.

57. Фокусировка фононов и электрон-фононное увлечение в полупроводниковых кристаллах с вырожденной статистикой носителей тока / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2016. – Т.150. – С.567-585.

58. Elastic behaviour of YAG under pressure / Y. K. Yogurtcu, A. J. Miller, G. A. Saunders. – Текст: непосредственный // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1980. – V.13. – P.6585-6597.

59. Overton, W.C. The Adiabatic Elastic Constants of Rock Salt / W. C. Overton, R. T. Swim. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1951. – V.84. – P.758-762.

60. McSkimin, H. J. Elastic Moduli of Diamond / H. J. McSkimin, W. L. Bond. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1957. – V. 105. – P.116-121.

61. McSkimin, H. J. Elastic Moduli of Silicon vs Hydrostatic Pressure at 25.0 C and 195.8 C / H. J. McSkimin, P. Andreatch. – Текст: непосредственный // Journal of Applied Physics. – 1964. – V.35. – P.2161-2165.

62. Huffman, D. R. Specific Heat and Elastic Constants of Calcium Fluoride at Low Temperatures / D. R. Huffman, M. H. Norwood. — Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1960. – V. 117. – P.709-711.

63. Galt, J.K. Mechanical Properties of NaCl, KBr, KCl / J. K. Galt. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1948. – V. 73. – P.1460-1462.

64. Drabble, J.R. Third order elastic constants of gallium arsenide / J. R. Drabble, A. J. Brammer. – Текст: непосредственный // Solid State Communications. – 1966. – V.4. – P.467-468.

65. Briscoe, C. V. Elastic Constants of LiF from 4.2 K to 300 K by Ultrasonic Methods / C. V. Briscoe,

С. F. Squire. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1957. – V. 106. – Р.1175-1177.

66. Wright, A. F. Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN / A. F. Wright. – Текст: непосредственный // Journal of Applied Physics. – 1997. – V. 82. – P.2833-2839.

67. Lehoczky, A. Elastic Constants of Mercury Selenide / A. Lehoczky, D. A. Nelson, C. R. Whitsett. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1969. – V. 188. – P.1069-1073.

68. Herring, C. Role of Low-Energy Phonons in Thermal Conduction / C. Herring. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1954. – V. 95. – P.954-965.

69. Simons, S. The absorption of very high frequency sound in dielectric solids / S. Simons. – Текст: непосредственный // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – 1957. – V.53. – P.702-716.

70. Kuleyev, I.G. Interaction of collinear and noncollinear phonons in anharmonic scattering processes and their role in ultrasound absorption of fast quasi-transverse modes in cubic crystals / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Yu. Arapova. – Текст: непосредственный // J. Phys.: Condens. Matter. – 2010. – V.22. – P.095403-095421.

71. Ансельм, А. И. Введение в теорию полупроводников / А. И. Ансельм. – Москва: Наука, 1978.
– 616 с. – Библиогр. в подстроч. примеч. – 25000 экз. – Текст: непосредственный.

72. Miller, G. F. On the propagation of elastic waves in aeolotropic media. III. Media of cubic symmetry / G. F. Miller, M. J. P. Musgrave. – Текст: непосредственный // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1956. – V. 236. – P. 352-383; Musgrave, M. J. P On the propagation of elastic waves in aeolotropic media. I. General Principles / M. J. P. Musgrave. – Текст: непосредственный //Proc. Roy. Soc. – 1954. – V. A226. – P. 339-356.

73. Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопроводах из материалов спинтроники / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ФММ. — 2017. – Т. 118. – С. 12-22.

74. Влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в монокристаллических нанопленках из материалов спинтроники / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2017. – Т. 118. – С. 332-344.

75. The influence of phonon focusing on density of states and the Knudsen phonon gas flow in nanowires with different types of anisotropy of elastic energy / I. I. Kuleyev, S. M. Bakharev, I. G. Kuleyev, V. V. Ustinov. – Текст: непосредственный // Physica Status Solidi C. – 2017. – V. 14. – P. 1600263-1600273.

76. Lax, M. Phonon magnification and the gaussian curvature of the slowness surface in anisotropic media: detector shape effects with application to GaAs / M. Lax, V. Narayanamurti. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1980. – V. 22. – P.4876-4897.

77. Shields, J. A. Channeling of acoustic phonons in silicon: the polarization dependence in elastic scattering / J. A. Shields, J. P. Wolfe, S. I. Tamura. – Текст: непосредственный // Z. Phys. B. – 1989. – V. 76. – P.295-301.

78. Jasiukiewicz, Cz. Phonon focussing patterns: Calculation of response of finite area detectors to pulsed ballistic beams of dispersive and dispersionless phonons / Cz. Jasiukiewicz, T. Paszkiewicz, D. Lehmann. – Текст: непосредственный // Z. Phys. B. – 1994. – V. 96. – P.213-222.

79. Taylor, B. Focusing of Phonons in Crystalline Solids due to Elastic / B. Taylor. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1971. – V.3. – P.1462-1472.

80. Held, E. Characterization of single-crystalline GaAs by imaging with ballistic phonons / E. Held, W. Klein, R. P. Huebener. – Текст: непосредственный // Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter. – 1989. – V.75. – P.17–29.

81. Northrop, G. A. Ballistic phonon imaging in germanium / G. A. Northrop, J. P. Wolfe. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1980. – V. 22. – Р.6196-6212.

82. Philip, J. Phonon magnification in cubic crystals / J. Philip, K. S. Viswanathan. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1978. – V. 17. – P.4969-4978.

83. Every, A. G. Ballistic phonons and the shape of the ray surface in cubic crystals / A. G. Every. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1981. – V. 24. – Р. 3456.

84. Погорелов, А. В. Дифференциальная геометрия (6-е издание) / А. В. Погорелов. – Москва: Наука, 1974. – 176 с. –5000 экз. – Текст: непосредственный.

85. Jasiukiewicz, C. Phonon Images of Crystals for Different Sources / C. Jasiukiewicz, T. Paszkiewicz.
— Текст: непосредственный // Acta physica polonica series A. – 1993. – V. 84. – P.459-473.

86. Mingo, N. Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations / N. Mingo. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 2003. – V. 68. – P. 113308.
87. Thermal conduction in doped single-crystal silicon films / M. Asheghi, K. Kurabayashi, R. Kasnavi, K. Goodson. – Текст: непосредственный // Journal of Applied Physics. – 2002. – V. 91. – P. 5079-5088.

88. Temperature-dependent thermal conductivity of undoped polycrystalline silicon layers / S. Uma, A. McConnell, M. Asheghi, K. Kurabayashi, K. Goodson. – Текст: непосредственный // International Journal of Thermophysics. – 2001. – V. 22. – P. 605-616.

89. Callaway, J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures / J. Callaway. – Текст: непосредственный // Physical Review. – 1959. –V. 113. – Р. 1046-1051.

90. Krumhansl, J. A. Thermal conductivity of insulating crystals in the presence of normal processes /

J. A. Krumhansl. – Текст: непосредственный // Proceedings of the Physical Society. – 1965. – V. 85. – P. 921-930.

91. Armstrong B. H. N processes, the relaxation-time approximation, and lattice thermal conductivity /
B. H. Armstrong. — Текст: непосредственный // Phys. Rev B. – 1985. – V. 32. – P. 3381-3390.

92. Кулеев, И.Г. Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и теплопроводность кристаллов германия с изотопическим беспорядком / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2001. – Т. 120. – С. 649-660; Влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на максимальные величины теплопроводности изотопически

чистых кристаллов кремния / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2002. – Т. 122. – С. 558-569.

93. Thermal conductivity of germanium crystals with different isotopic compositions / M. Asen-Palmer, K. Bartkowski, E. Gmelin, M. Cardona, A. P. Zhernov, A. V. Inyushkin, A. N. Taldenkov, V. I. Ozhogin, K. M. Itoh, E. E. Haller. – Текст: непосредственный // Physical review B. – 1997. – V. 56. – P. 9431-9447.

94. Жернов, А. П. Влияние композиции изотопов на фононные моды. Статические атомные смещения в кристаллах / А. П. Жернов, А. В. Инюшкин – Текст: непосредственный // УФН. – 2001. – Т. 171. – С. 827-854; Кинетические коэффициенты в кристаллах с изотопическим беспорядком / А. П. Жернов, А. В. Инюшкин. – Текст: непосредственный // УФН. – 2002. – Т. 172. – С. 573-599.

95. Holland, M. G. Analysis of lattice thermal conductivity / M. G. Holland. – Текст: непосредственный // Physical Review. – 1963. – V. 132. – P. 2461-2471.

96. Landau, L. Absorption of sound in solids / L. Landau, G. Rumer. – Текст: непосредственный // Phys. Z. Sowjetunion. – 1937. – V. 11. – P. 18–25.

97. Simons, S. On the Mutual Interaction of Parallel Phonons / S. Simons. – Текст: непосредственный // Proc. Phys. Soc. – 1963. – V. 82. – P. 401-405.

98. Kuleyev, I. G. Anharmonic processes of scattering and absorption of slow quasi-transverse modes in cubic crystals with positive and negative anisotropies of second-order elastic moduli / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Yu. Arapova. – Текст: непосредственный // Journal of Physics: Condensed Matter. –

2008. - V. 20. - P. 465201.

99. Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллов кремния в режиме граничного рассеяния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин. — Текст: непосредственный / ФТТ. – 2013. – Т. 55. – С. 1441-1450.

100. Klemens, P. G. The scattering of low-frequency lattice waves by static imperfections / P. G. Klemens – Текст: непосредственный // Proceedings of the Physical Society. Section A. – 1955. – V. 68. – P. 1113-1128.

101. Tamura, S. I. Isotope scattering of dispersive phonons in Ge / S. I. Tamura. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1983. – V. 27. – Р. 858-866.

102. Жернов, А. П. Изотопические эффекты в твердых телах / А. П. Жернов, А. В. Инюшкин. – Москва: Российский научный центр" Курчатовский институт", 2001. – 216 с. – Библиогр.: с. 198-216. – 5600 экз. – Текст: непосредственный

103. Kuleyev, I. G. Quasi-transverse ultrasound absorption due to point defects and anharmonic scattering processes in cubic crystals with positive and negative anisotropies of the second-order elastic

moduli / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Y. Arapova. – Текст: непосредственный // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – V. 19. – Р. 406216.

104. Carruthers, P. Theory of Thermal Conductivity of Solids at Low Temperatures / P. Carruthers. — Текст: непосредственный // Rev. Mod. Phys. – 1961. – V. 33. – P. 92–138.

105. Zaitlin, M. P. Boundary scattering of phonons in noncrystalline materials / M. P. Zaitlin, L. M. Scherr, A. C. Anderson. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1975. – V.12. – P.4487–4492.
106. Harrison, J. P. Thermal Conductivity of Cerium Magnesium Nitrate / J. P. Harrison, J. P. Pendrys. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1973. – V.7. – P. 3902–3906.

107. Subsurface damage of abraded silicon wafers / H. Lundt, M. Kerstan, A. Huber, P. O. Hahn. – Текст: непосредственный // Proceedings of the 7th International Symposium on Silicon Materials Science and Technology. – The Electrochemical Society. – 1994. – P. 218-224.

108. Herring, C. Theory of the Thermoelectric Power of Semiconductors / C. Herring. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1954. – V. 96. – P.1163-1187.

109. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices / M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. Lett. – V. 61. – P.2472-2475.

110. Magnetoresistance and magnetization of Fe/Cr(001) superlattices with noncollinear magnetic ordering / V. V. Ustinov, N. G. Bebenin, L. N. Romashev, V. I. Minin, M. A. Milyaev, A. R. Del, A. V. Semerikov. – Текст: непосредственный // Physical Review B. – 1996. – V. 54. – P. 15958-15966. 111. Holloway, H. Giant magnetoresistaneein Co/Cu multilayers with Co layers of alternating thicknesses / H. Holloway, D. J. Kubinski. – Текст: непосредственный // J. Appt. Phys. – V. 79. – P. 7090-7094.

112. Гигантское магнитосопротивление сверхрешеток CoFe/Cu с буферным слоем (Ni80Fe20)60Cr40 / Н. С. Банникова, М. А. Миляев, Л. И. Наумова, В. В. Проглядо, Т. П. Криницина, И. Ю. Каменский, В. В. Устинов. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2015. – Т. 116. – С. 1040-1046.

113. Giant drop of magnetic hysteresis with decreasing thickness of Cr-buffer layer of CoFe/Cu superlattices / M. A. Milyaev, L. I. Naumova, V. V. Proglyado, T. P. Krinitsina, N. S. Bannikova, V. V. Ustinov. – Текст: непосредственный // Solid State Phenomena. – 2011. – V. 168-169. – P. 303-306.

114. Giant tunneling magnetoresistance at room temperature with MgO(100) tunnel barriers / S. P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P. M. Rice, B. Hughes. – Текст: непосредственный // Nature Mater. – 2004. – V. 3. – P. 862-867.

115. Giant room temperature magnetoresistanse in single-crystal Fe/MgO/Fe magnetic tunnel junctions / S. Yuasa, T.Nagahama, A. Fukushima, Y. Suzuki, K. Ando. – Текст: непосредственный // Nature Mater. – 2004. – V. 3. – P. 868-871.

116. Electrical detection of spin transport in lateral ferromagnet–semiconductor devices / X. Lou,
C. Adelmann, S. A. Cruker, E. S. Garlid, J. Zhang, K. S. M. Reddy, S. D. Flexner, C. J. Palmstrøm, P. A.
Crowell. – Текст: непосредственный // Nature Physics – 2007. – V. 3. – P. 197-202.

117. Электрические инжекция и детектирование спин-поляризованных электронов в латеральных спиновых клапанах на гетеропереходах ферромагнитный металл–полупроводник InSb /
Н. А. Виглин, В. В. Устинов, В. М. Цвелиховская, Т. Н. Павлов. – Текст: непосредственный // Письма в ЖЭТФ. – 2015. – Т. 101. – С. 118–123.

118. Rayne, J. A. Elastic Constants of Iron from 4.2 to 300 K / J. A. Rayne, B. S. Chandrasekhar. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1961. – V. 122. – Р. 1714-1716.

119. Ledbetter, H. M. Elastic Properties of Metals and Alloys. II Copper / H. M. Ledbetter, E. R. Naimon. – Текст: непосредственный // J. Phys. Chem. – 1974. – V. 3. – P. 897-935.

120. Кулеев, И. Г. Анизотропия теплопроводности монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2014. – Т. 146. – С. 525-539.

121. Sondheimer, E. H. The mean free path of electrons in metals / E. H. Sondheimer. – Текст: непосредственный // Adv. Phys. – 1952. – V. 1. – Р. 1-42.

122. Aksamija, Z. Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes / Z. Aksamija, I. Knezevic. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 82. – P. 045319.

123. Blakemore, J. S. Semiconducting and other major properties of gallium arsenide / J. S. Blakemore. – Текст: непосредственный // J.Appl. Phys. – 1982. – V. 53. – R123-R181.

124. Thermopower measurements of the coupling of phonons to electrons and composite fermions / B. Tieke, R. Fletcher, U. Zeitler, M. Henini, J. C. Maan. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B – 1998 – V. 58. – P. 2017-2025.

125. Аскеров, Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б. М. Аскеров. – Москва: Наука, 1985. – 320 с. – Библиогр.: с. 310-318. – 3350 экз. – Текст: непосредственный.

126. Зырянов, П.С. Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках / П. С. Зырянов, М. И. Клингер. – Москва: Наука, 1976. – 480 с. – Библиогр.: с. 468-480. – 5000 экз. – Текст: непосредственный.

127. Цидильковский, И. М. Термомагнитные явления в полупроводниках / И. М. Цидильковский.
 – Москва: Наука, 1960. – 396 с. – Текст: непосредственный

128. Parrott, J. E. Some Contributions to the Theory of Electrical Conductivity, Thermal Conductivity and Termoelectric Power in Semiconductors / J. E. Parrott. – Текст: непосредственный // Proc. Phys. Soc. – 1957. – V. 70. – P. 590-607.

129. Appel, J. Thermokraft von Nichtpolaren Halbleitern / J. Appel. – Текст: непосредственный // Zs. Naturforcen. – 1957. – V. 12a. – P. 410-416.

130. Appel, J. Thermomagnetische Effekte von Nichtpolaren Isotropen Halbleitern / J. Appel. — Текст: непосредственный // Zs. Naturforcen. – 1958. – V. 13a. – Р. 386-394.

131. Гуревич, Л. Э. Термоэлектрические коэффициенты в металлах в сильном магнитном поле и влияние увлечения электронов фононами / Л. Э. Гуревич, Г. М. Недлин. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 1959. – т. 37. – С. 766-775.

132. Гуржи, Р. Н. Гидродинамические эффекты в твердых телах при низких температурах / Р. Н. Гуржи. – Текст: непосредственный // УФН. – 1968. – Т. 94. – С. 689-718.

133. Гуржи, Р. Н. Низкотемпературная электропроводность чистых металлов / Р. Н. Гуржи, А. И. Копелиович. – Текст: непосредственный // УФН. – 1981. – Т. 133. – С. 33-74.

134. Зырянов, П. С. Квантовая теория термомагнитных явлений в металлах и полупроводниках /

П. С. Зырянов, Г. И. Гусева. – Текст: непосредственный // УФН. – 1968. – Т. 95. – С. 565-612.

135. Гуревич, Л. Э. Влияние увлечения электронов фононами и их "взаимного" увлечения на кинетические коэффициенты полуметаллов / Л. Э. Гуревич, И. Я. Коренблит. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 1964. – Т. 6. – С. 856-863.

136. Ланг, И.Г. Теория увлечения электронов фононами в магнитном поле / И. Г. Ланг, С. Т. Павлов. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 1972. – Т. 63. – С. 1495-1503.

137. Гуревич, Л.Э. Термоэлектрические свойства проводников / Л. Э. Гуревич. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 1946. – т. 16. – С. 193-227.

138. Гуревич, Л.Э. Термомагнитные и гальваномагнитные свойства проводников / Л. Э. Гуревич.
– Текст: непосредственный //ЖЭТФ. – 1946. – т. 16. – С. 416-422.

139. Geballe, T. H. Seebeck Effect in Germanium / T. H. Geballe, G. W. Hull. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1954. – V. 93. – Р. 1134-1140.

140. Frederikse, H. P. R. Thermoelectric Power of Germanium below Room Temperature / H. P. R. Frederikse. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1953. – V.92. – P.248-252.

141. Herring, C. Phonon-Drag Thermomagnetic Effekts in n-Type Germanium. I. General Survey / C. Herring, T. H. Geballe, J. E. Kunzler. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1958. – V. 111. – P. 1163-1187.

142. Sondheimer, E. H. The Kalvin Relations in Thermo-electricity / E. H. Sondheimer. – Текст: непосредственный // Proc. Roy. Soc. – 1956. – A234. – P. 391-398.

143. Hanna, I. I. Electron and Lattice Conduction in Metal / I. I. Hanna, E. H. Sondheimer. – Текст: непосредственный // Proc. Roy. Soc. – 1957. – A238. – P. 247-266.

144. Кулеев, И. Г. Эффекты взаимного увлечения электронов и фононов и электронный перенос
в вырожденных проводниках / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 1999. – Т. 87.
– С. 5-17.

145. Кулеев, И. Г. Электрон-фононное увлечение, термоэлектрические эффекты и теплопроводность вырожденных проводников / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 1999. – т. 41. – с. 1753-1762.

146. Кулеев, И. Г. Кинетические коэффициенты неравновесных электрон-фононных систем вырожденных проводников в классических магнитных полях / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2000. – Т. 89. – с. 29-40

147. Кулеев, И. Г. Влияние взаимного увлечения электронов и фононов на термомагнитные и термоэлектрические явления в проводниках с вырожденной статистикой носителей тока / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2000. – т. 42. – с. 979-985.

148. Кулеев, И. Г. О взаимном увлечении электронов и фононов и о низкотемпературных аномалиях термоэлектрических и термомагнитных эффектов в кристаллах HgSe:Fe / И. Г. Кулеев, И. Ю. Арапова. – Текст: непосредственный // ФТП. – 2000. – Т. 34. – С. 947-954

149. Кулеев, И. Г. Влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на взаимное увлечение электронов и фононов и кинетические эффекты в вырожденных проводниках / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2000. – Т. 42. – с. 1952-1960.

150. Кулеев, И. Г. Нормальные процессы рассеяния квазичастиц и кинетические эффекты в полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока / И. Г. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФТТ. – 2002. – Т. 44. – с. 215-225.

151. Кулеев, И. Г. Роль нормальных процессов электрон-электронного и фонон-фононного рассеяния в термогальваномагнитных эффектах в металлах / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2001. – Т. 91. – С. 3-13.

152. Кулеев, И.Г. Термогальваномагнитные эффекты в металлах в адиабатических условиях. Роль нормальных процессов электрон-электронного и фонон-фононного рассеяния в термогальваномагнитных эффектах в металлах / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев. – Текст: непосредственный // ФММ. – 2001. – Т. 91. – С. 19–27.

153. Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и термоэдс увлечения в кристаллах германия с изотопическим беспорядком / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, А. Н. Талденков, А. В. Инюшкин, В. И. Ожогин, К. Ито, Ю. Халлер. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 2003. – Т. 123. – С. 1227-1238

154. Кулеев, И.Г. Электрон-фононное увлечение, нормальные процессы рассеяния квазичастиц и кинетические эффекты в металлах и полупроводниках : специальность 01.04.07 "физика конденсированного состояния" : автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора

физико-математических наук / Кулеев Игорь Гайнитдинович ; Институт физики металлов УрО РАН. — Екатеринбург, 2001. — 38 с. : ил. - Библиогр.: с. 33-38. — Место защиты: ИФМ УрО РАН — Текст: непосредственный.

155. MacDonald, D. K. C. Thermo-electricity at low temperatures VII. Thermo-electricity of the alkali metals between 2 and 20 °K / D. K. C. MacDonald, W. B. Pearson, I. M. Templeton. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1958. – V. 248. – P. 107-118; Thermo-electricity at low temperatures VIII. Thermo-electricity of the alkali metals below 2°K / D. K. C. MacDonald, W. B. Pearson, I. M. Templeton. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1958. – V. 248. – P. 107-118; Thermo-electricity at low temperatures VIII. Thermo-electricity of the alkali metals below 2°K / D. K. C. MacDonald, W. B. Pearson, I. M. Templeton. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1960. – V. 256. – P. 334-358.

156. Guenault, A. M. Electron and phonon scattering Thermoelectricity in potassium and alloys at very low temperatures / A. M. Guenault, D. K. C. MacDonald. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1961. – V. 264. – P. 41-59.

157. Stinson, M. R. Thermomagnetic and thermoelectric properties of potassium / M. R. Stinson, R. Fletcher, C. R. Leavens. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B – 1979. – V. 20. – P. 3970-3990. 158. Fletcher, R. Scattering of phonons by dislocations in potassium / R. Fletcher. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1987. – V. 36. – P. 3042-3051.

159. Thermoelectric power of metals / F. J. Blatt, P. A. Schroeder, C. L. Foiles, D. Greig. – New York and London: Plenum press, 1976. – 264 р. – ISBN 978-1-4613-4270-0 – Текст: непосредственный.

160. Kuleyev, I. I. Dynamic Properties and Focusing of Phonons in Metallic and Dielectric Crystals of Cubic Symmetry. Review 1 / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). – 2023. – V. 124. – P. 1-30.

161. Ziman, J. M. The thermoelectric power of the alkali metals at low temperatures / J. M. Ziman. – Текст: непосредственный // Phil. ag. – 1959. – V. 4. – Р.371-379.

162. Herring, C. Transport and Deformation-Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with Anisotropic Scattering / C. Herring, E. Vogt. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1956. – V. 101. – P. 944-961.

163. Кардона, П. Ю. М. Основы физики полупроводников / П. Ю. М. Кардона; пер. с англ. И. И.
Решиной. Под ред. Б. П. Захарчени – Москва: Физматлит, 2002. – 560 с. – Библиогр.: с. 509-541 – 1200 экз. – ISBN 5-9221-0268-0 – Текст: непосредственный.

164. Mahan, G.D. The Seebeck coefficient and phonon drag in silicon / G. D. Mahan, L. Lindsay, D. A. Broido – Текст: непосредственный // J. Apl. Phys. – 2014. – V. 116. – P.245102.

165. Kaveh, M. Electrical resistivity of potassium at low temperatures // M. Kaveh, N. Wiser. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B – 1974. – V. 9. – P. 4053-4059.

166. Ekin, J.W. Electrical Resistivity of Potassium from 1 to 25 °K / J. W. Ekin, B. W. Maxfield. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1971. – V. 4. – P. 4215-4225.

167. Силин, В. П. Введение в кинетическую теорию газов / В. П. Силин. – Москва: Физматлит, 1971. – 332 с. – Библиогр.: с. 324-331 – 4900 экз. – Текст: непосредственный.

168. Биккин, Х. М. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика / Биккин Х. М., И. И. Ляпилин. – Екатеринбург: УрО РАН, 2009. – 500 с. – Библиогр.: с. 493-499 – 150 экз. – ISBN 978-5-7691-2034-3 – Текст: непосредственный.

169. Рёпке, Г. Неравновесная статистическая механика / Г. Рёпке; пер. с немец. С. В. Тищенко Под ред. Д. Н. Зубарева – Москва: Мир, 1990. – 320 с. – Библиогр.: с. 311-315 – 4050 экз. – ISBN 5-03-001057-2 – Текст: непосредственный.

170. Конуэлл, Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях / Э.
Конуэлл; пер. с англ. А. Ф. Волкова и А. Я. Шульман. Под ред. И. Б. Левинсона и Ю. К. Пожелы – Москва: Мир, 1970. – 384 с. – Библиогр.: с. 379-381 – Текст: непосредственный.

171. Gugan, D. The electrical resistivity of potassium below 4.2 K / D. Gugan. – Текст: непосредственный //Proc. R. Soc. Lond. A. – 1971. – V. 325. – P.223-249

172. Dugdale, J. S. The effect of pressure on the electrical resistance of lithium, sodium and potassium at low temperatures / J. S. Dugdale, D. Gugan. – Текст: непосредственный // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1962. – V. 270. – P. 186-211.

173. Chi, T. C. Electrical resistivity of alkali elements / T. C. Chi. — Текст: непосредственный // J. of Phys. and Chem. Ref. Data. – 1979. – V. 8. – P. 339-438.

174. Trofimenkoff, P. Electron-Phonon Umklapp Scattering Processes in the Low-Temperature Ultrasonic Attenuation and Electrical Resistivity of Potassium / P. Trofimenkoff, J. W. Ekin. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B – 1971. – V. 4. – P. 2392-2397.

175. Phonon Focusing and Electron Transport in Potassium Single Crystals. Review 2 / I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev. – Текст: непосредственный // Physics of Metals and Metallography (english only). – 2023. – V. 124. – P. 31-58.

176. Smoluchowski, M. Zur kinetischen Theorie der Transpiration und Diffusion verdünnter Gase / M. Smoluchowski. – Текст: непосредственный // Annalen der Physik. – 1910. – V. 338. – P. 1559-1570. 177. Singh, A. K. Electrical Resistivity of Noble Metals by Krebs's Method / A. K. Singh, P. K.Sharma.

– Текст: непосредственный // Phys. Stat. sol. – 1969. – V. 32. – Р. 209-215.

178. Pal, S. Electrical Resistivity of Noble Metals / S. Pal. – Текст: непосредственный // Can. J. Phys. – 1973. – V. 51. – P. 2225-2232.

179. Matula, R. A. Electrical resistivity of copper, gold, palladium, and silver / R. A. Matula. – Текст: непосредственный // J. Phys. Chem. Ref. data. – 1979. – V. 8. – Р. 1147-1298.

180. Lawrence, W.E. Electron-electron scattering in the low-temperature resistivity of the noble metals / W. E. Lawrence. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. B. – 1976. – V. 13. – P. 5316-5319.

181. Neighbovrs, J. R. Elastic Constants of Silver and Gold / J. R. Neighbovrs, G. A. Alers. – Текст: непосредственный // Phys. Rev. – 1956. – V. 101. – P.944-961.

182. Ziman, J.M. The ordinary transport properties of the noble metals / J. M. Ziman. – Текст: непосредственный // Advances in Physics. – 1961. – V. 10. – P.1-56.

183. Pippard, A. B. An Experimental Determination of the Fermi Surface in Copper / A. B. Pippard. – Текст: непосредственный // Phil. Trans. A. – 1957. – V. 250. – P.325-356.

184. Shoenberg, D. The Fermi Surfaces of Copper, Silver and Gold I. The de Haas-van Alphen Effect / D. Shoenberg. – Текст: непосредственный // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A – 1962. – V. 255. – P. 85-133.

185. Roaf, D. J. The Fermi Surfaces of Copper, Silver and Gold II. Calculation of the Fermi Surfaces /

D. J. Roaf. – Текст: непосредственный // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. – 1962. – V. 255. – P. 135-152.

186. Каллуэй, Дж. Теория энергетической зонной структуры / Дж. Каллуэй; пер. с англ. В. П. Широковского Под ред. С. В. Вонсовского — Москва: Мир, 1969. — 360 с. – Библиогр.: с. 324-349 – Текст: непосредственный.

187. Гуржи, Р.Н. Электропроводность металлов с учетом увлечения фононов / Р. Н. Гуржи, А. И. Копелиович. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 1971. – Т. 61. – С. 2514-2528.

188. Гуржи, Р.Н. Низкотемпературная электропроводность металлов с закрытыми поверхностями Ферми / Р. Н. Гуржи, А. И. Копелиович. – Текст: непосредственный // ЖЭТФ. – 1973. – Т. 64. – С. 380-390.

189. Joshi, Y. P. Effect of phonon focussing on thermal conductivity of silicon / Y. P. Joshi. – Текст: непосредственный // Pramana. – 1982. – V.18. – P.461-472.

Приложение А Скорости релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах монокристаллических образцов конечной длины

A.1 Релаксация фононов на границах образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечением

Рассмотрим фононный транспорт в образцах бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями в рамках теории Казимира – МакКарди и др. [8, 15] и определим времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах. Выберем направление градиента температуры вдоль оси образца и обозначим это направление X_3 . Проведем сечение образца плоскостью, перпендикулярной оси X_3 и проходящей через точку $X_3 = 0$ (см. рисунки А.1 и А.2). Рассмотрим элемент поверхности dS в окрестности точки с координатами (X_1, X_3). Обозначим через $\mathbf{m}(X_1)$ единичный вектор, перпендикулярный поверхности образца и



Рисунок А.1 – Распределение температуры в образце длины *L* (сплошная линия) и в бесконечном образце (пунктирная линия). Рисунок взят из работы [15].

направленный внутрь его. Поток фононов с волновым вектором **q** и поляризацией λ , покидающих этот элемент поверхности, равен $(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^{\lambda})N_{q\lambda}^{(0)}(X_3,\mathbf{q})dS$, где \mathbf{V}_g^{λ} — групповая скорость фононов, $N_{q\lambda}^{(0)}(X_3,\mathbf{q}) = (\exp(\hbar\omega_{q\lambda}/k_BT(X_3))-1)^{-1}$ — функция распределения Планка, соответствующая температуре $T(\mathbf{X}_3)$ рассматриваемого элемента. Фононы, покидающие элемент поверхности dS, будут распространяться вдоль стержня, пока не столкнутся с поверхностью. Пусть вектор $\Lambda^{\lambda}(X_1,\mathbf{q})$ определяет длину и направление свободного пробега



Рисунок А.2 – Схематичное изображение образца длины *L* с произвольным поперечным сечением. Рисунок взят из работы [15].

фонона с волновым вектором **q** и поляризацией λ . Предполагая, что распределение температур и потока тепла однородно по образцу, авторы [15] подсчитали поток тепла, протекающий через плоскость $X_3 = 0$ слева направо и справа налево, и получили следующее выражение для теплопроводности

$$\kappa_{\infty}(T) = \frac{1}{2S_c} \sum_{\lambda,q} \hbar \omega_{q\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \int_{X_1} dX_1 \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda} \right) \left(\Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right)^2 = \sum_{\lambda,q} \hbar \omega_{q\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} I_{\infty}^{\lambda}, \qquad (A.1)$$
$$I_{\infty}^{\lambda} = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda} \right) \left(\Lambda_3^{\lambda}(X_1, q) \right)^2 dX_1, \qquad (A.2)$$

где S_c — площадь поперечного сечения образца, $\Lambda_3^{\lambda}(X_1, q)$ - проекция длины пробега фонона на направление градиента температуры.

На рисунке А.3 приведена схема вычисления интеграла по контуру X₁ для цилиндрических образцов бесконечной длины, где *R* - радиус цилиндра. Фонон покидает элемент поверхности в точке X₁ в направлении вектора групповой скорости \mathbf{V}_{g}^{λ} . Компоненты $V_{g,3}^{\lambda}$ и $V_{g,1}^{\lambda} = \sqrt{(V_{g,3}^{\lambda})^2 - (V_{g,3}^{\lambda})^2}$ являются проекциями вектора групповой скорости на ось цилиндра и



Рисунок А.3 – Схема, иллюстрирующая вычисление контурного интеграла для цилиндрических образцов (показано сечение цилиндра плоскостью, перпендикулярной его оси) (см. [38]).

секущую плоскость, соответственно. Обозначим $\Lambda^{\lambda}_{\perp}(X_1, \mathbf{q})$ проекцию длины свободного пробега фононов на плоскость сечения. На рисунке А.3 она равна длине отрезка X_1A . Проекция длины свободного пробега на ось стержня $\Lambda^{\lambda}_3(X_1, \mathbf{q})$ связана с $\Lambda^{\lambda}_{\perp}(X_1, \mathbf{q})$ соотношением:

$$\Lambda_{3}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q}), \quad V_{g\perp}^{\lambda} = \sqrt{\left(V_{g1}^{\lambda}\right)^{2} + \left(V_{g2}^{\lambda}\right)^{2}} .$$
(A.3)

Введем угол γ_1 между осью *Y* и нормалью к окружности $\mathbf{m}(X_1)$ в точке X_1 , а также угол ϕ между компонентой $V_{g\perp}^{\lambda}$ и осью *Y*. Из геометрии рисунка следует, что $\Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) = 2R\cos(\phi - \gamma_1)$, тогда

$$\Lambda_{3}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} 2R\cos(\phi - \gamma_{1}), \quad \left(\mathbf{m}(X_{1})\mathbf{V}_{g}^{\lambda}\right) = V_{g\perp}^{\lambda}\cos(\phi - \gamma_{1}). \tag{A.4}$$

Для образца с круглым сечением полагаем $dX_1 = Rd\gamma_1$. Вклад в контурный интеграл (A1) дают только фононы, отраженные элементом поверхности по направлению внутрь образца. Поэтому для заданного угла φ интегрируем по углам γ_1 только в пределах сектора между точками B1 и B2 (сектор выделен жирной линией на рисунке). Итак, из физического анализа задачи следует, что контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему контуру, как это указано в [24], а должны охватывать только половину контура. Поэтому область интегрирования X_1 и соответствующие значения углов γ_1 для бесконечного образца ограничены значениями $-\pi/2 < \gamma_1 - \phi < \pi/2$ (см. рисунок А.3). Для бесконечного образца с круглым сечением находим релаксационную функцию

$$I_{\lambda}^{\infty} = \frac{4R^{3}}{2S_{c}} \frac{\left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \int_{X_{1}} \cos^{3}(\phi - \gamma_{1}) d\gamma_{1} = \frac{8R}{3\pi} \frac{\left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}}{V_{g\perp}^{\lambda}} .$$
(A.5)

Выражение (А.5) совпадает с полученным в работе [15].

Теперь рассмотрим стержень бесконечной длины с прямоугольным сечением $D \times \mu D$ (см. рисунок А.4). Пусть V_{g3}^{λ} - проекция групповой скорости на направление градиента температуры, которое совпадает с осью стержня, $V_{g\perp}^{\lambda}$ - проекция групповой скорости на плоскость сечения стержня, V_{g1}^{λ} и V_{g2}^{λ} - проекции групповой скорости на боковые грани образца. На рисунке унок А.4 приведен случай $tg\phi = |V_{g2}^{\lambda}|/|V_{g1}^{\lambda}| < \mu$. При вычислении интеграла по контуру X₁ выделим три области «А», «В» и «С» (см. рисунок А.4): область «А» – это треугольник с вершинами ODF, область «В» – параллелограмм OFHG и область «С» – треугольник GH(μ D). Как и в случае образцов с круглым сечением, контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему прямоугольному контуру, а захватывают только его половину. Дело в том, что при диффузном



Рисунок А.4 – Сечение образца в форме прямоугольного стержня плоскостью перпендикулярной его длинной оси. Показан случай $tg\phi = |V_{g2}^{\lambda}|/|V_{g1}^{\lambda}| > 1/\mu$. Жирными линиями отмечена та часть контура X_1 , по которому вычисляется интеграл (см. [38]).

рассеянии фонона на границе для фиксированного угла ϕ мы должны выполнить интегрирование только по тем сторонам сечения образца, где скорость рассеянного фонона направлена внутрь образца (жирные линии на рисунке А.4). Обозначим $\Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})$ проекцию длины свободного пробега на плоскость сечения. В области «В» она равна длине отрезка X_1E . Проекция длины свободного пробега на ось стержня $\Lambda_{3}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})$ связана с $\Lambda_{\perp}^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})$ соотношением (А.3). В случае $tg \phi = |V_{g2}/V_{g1}| < \mu$ в области «А» имеем:

$$(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^{\lambda}) = V_{g\perp}^{\lambda} \cdot \sin\phi, \quad \Lambda_1^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) = \frac{D - x}{\cos\phi}, \quad \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) = \Lambda_1^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}}.$$
(A.6)

Учитывая выражения (А.6), для интеграла по области «А» получим:

$$I_{\infty}^{\lambda}(A) = \frac{1}{2S_c} \int_{0}^{D} V_{g\perp}^{\lambda} \cdot \sin \phi \left\{ \frac{D-x}{\cos \phi} \cdot \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \right\}^2 dx = \frac{D^3}{2S_c} \left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}} \right)^2 \frac{\left|V_{g2}^{\lambda}\right|}{3}.$$
(A.7)

Аналогично для областей «В» и «С» получим:

$$I_{\infty}^{\lambda}(B) = \frac{D^{3}}{2S_{c}} \left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}}\right)^{2} \left(\mu |V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}|\right), \ I_{\infty}^{\lambda}(C) = I_{\infty}^{\lambda}(A) .$$
(A.8)

Суммируя по всем областям при $\left|V_{g\,2}^{\,\lambda}\right| < \mu \left|V_{g\,1}^{\,\lambda}\right|$ для функции $I_{\infty}^{\,\lambda}(\theta, \phi)$ получим

$$I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{D}{6\mu} \left[\left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}} \right)^2 \left(3\mu \left| V_{g1}^{\lambda} \right| - \left| V_{g2}^{\lambda} \right| \right) \right].$$
(A.9)

Аналогично рассматривается случай $tg\phi = \left|V_{g2}^{\lambda}\right| / \left|V_{g1}^{\lambda}\right| > \mu$:

$$I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \mu \frac{D}{6} \left[\left(\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g2}^{\lambda}} \right)^2 \left(3 \left| V_{g1}^{\lambda} \right| - \mu \left| V_{g1}^{\lambda} \right| \right) \right].$$
(A.10)

Формулы (А.9) и (А.10) совпадают с полученными в работе [15]. Для того чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (А.9) и (А.10) положить $\mu = 1$. Итак, предложенный нами метод расчета релаксационных функций $I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ для образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями приводит к тем же результатам, что и в работе [15]. Из сравнения формулы (А.1) со стандартным выражением теплопроводности [29-31, 38] в приближении времени релаксации

$$\kappa(T) = k_B \sum_{q,\lambda} \tau^{\lambda}(q) (V_{g3}^{\lambda})^2 \left(\frac{\hbar \omega_q^{\lambda}}{k_B T}\right)^2 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)$$
(A.11)

можно определить скорость релаксации фононов $\nu^{\lambda}(q) = (\tau^{\lambda}(q))^{-1}$ при диффузном рассеянии на границах образцов бесконечной длины следующим образом

$$v_{B_{\infty}}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{\left(V_{g3}^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{2}}{I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi)}.$$
(A.12)

Из формул (А.5), (А.9) и (А.10) для образцов с круглым и прямоугольным сечениями, соответственно, имеем

$$\nu_{B_{\infty}}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{3\pi}{8R} \cdot \sqrt{\left(V_{g}^{\lambda}\right)^{2} - \left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}}, \qquad (A.13)$$

$$v_{B\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \begin{cases} \frac{6\mu}{D} \frac{(V_{g1}^{\lambda})^{2}}{(3\mu|V_{g1}^{\lambda}| - |V_{g2}^{\lambda}|)}, \operatorname{если} |V_{g2}| < \mu |V_{g1}|; \\ \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^{\lambda})^{2}}{(3|V_{g2}^{\lambda}| - \mu |V_{g1}^{\lambda}|)}, \operatorname{если} |V_{g2}| > \mu |V_{g1}|. \end{cases}$$
(A.14)

Выражение (А.13) для скорости релаксации фононов на границах бесконечных образцов с круглым сечением совпадает с полученным ранее выражением в работе [189].

Определим среднюю длину свободного пробега фононов Λ_{∞} для образцов бесконечной длины в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Рассмотрим область температур, гораздо меньших температуры Дебая ($T << T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Воспользуемся известным выражением кинетической теории газов для теплопроводности

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V \, \overline{S} \, \Lambda_\infty \,. \tag{A.15}$$

Приведем формулу (A.11) для теплопроводности к виду (A.15). Для этого выделим теплоемкость единицы объема C_v и среднюю скорость фононов \overline{S}

$$C_{V} = \frac{2\pi^{2}k_{\mathbf{B}}^{4}}{5\hbar^{3}}T^{3}\frac{1}{3}\sum_{\lambda}\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right\rangle, \quad \overline{S} = \sum_{\lambda}\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2}\right\rangle \left\{\sum_{\lambda}\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right\rangle\right\}^{-1}, \quad (A.16)$$

где
$$\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-3}\right\rangle = \int d\Omega_q \left(S^{\lambda}\right)^{-3} / 4\pi$$
 и $\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2}\right\rangle = \int d\Omega_q \left(S^{\lambda}\right)^{-2} / 4\pi$. Тогда выражение для средней длины

пробега $\Lambda_{B\infty}$ может быть представлено в виде:

$$\Lambda_{\infty} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \left\langle \left(S^{\lambda 1}\right)^{-2} \right\rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^{1} dx \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{\left(S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^{3}}, \quad x = \cos\theta \cdot \tag{A.17}$$

Значения средних скоростей фононов и теплоемкости кристаллов кремния приведены в таблице А.1.

Таблица А.1 – Параметры, определяющие длину свободного пробега фононов для кристаллов кремния при низких температурах (см. [38]).

мода	$\left< \left(S^{\lambda}(heta, arphi) ight)^{-2} \right>,$	$\bar{S}^{\lambda}, 10^5 (\text{cm}\cdot\text{c}^{-1})$	C_V^{λ}/T^3 ,	\overline{S} , 10^5 (cmc ⁻¹)	C_V/T^3 ,
	$10^{-12} (c^2 cm^{-2})$		эрг·см ⁻³ К ⁻⁴		эрг·см ⁻³ К ⁻⁴
L	1.213	9.069	0.5478		
t_1	3.081	5.688	2.2156	5.668	5.899
t_2	3.873	5.058	3.1360		

Как видно из выражений (А.15) - (А.17), в дебаевском приближении теплопроводность пропорциональна теплоемкости и при низких температурах следует зависимости T^3 - в соответствии с законом Дебая. Этот результат привлек внимание исследователей к теории Казимира [15] (заметим, что формула для теплопроводности в работе [15] содержит известную ошибку – лишний множитель $\pi/2$). Аналогичным образом можно определить среднюю длину свободного пробега фононов для каждой колебательной моды. Для этого представим теплопроводность в виде аддитивной суммы всех колебательных мод

$$\kappa_{\infty}(T) = \sum_{\lambda} \kappa_{\infty}^{\lambda}(T) = \sum_{\lambda} \frac{1}{3} C_{V}^{\lambda} \, \bar{S}^{\lambda} \Lambda_{\infty}^{\lambda} \,. \tag{A.18}$$

Тогда средняя длина пробега $\Lambda^{\lambda}_{\infty}$ для фононов ветви λ может быть представлена в виде

$$\Lambda_{\infty}^{\lambda} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2} \right\rangle} \int_{-1}^{1} dx \int_{0}^{2\pi} d\varphi \ \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi)}{\left(S^{\lambda}(\theta,\varphi)\right)^{3}}.$$
(A.19)

Для образцов с круглым сечением в качестве I_{∞}^{λ} надо взять выражение (А.5), а для образцов с прямоугольным сечением - (А.9) и (А.10). Итак, длины свободного пробега фононов при низких температурах для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума выражаются через двукратный угловой интеграл.

А.2 Скорости релаксация фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями

Рассмотрим кнудсеновское течение фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определим времена релаксации при диффузном рассеянии фононов на границах в рамках теории МакКарди и др. [15]. В этой теории предполагается, что вклад в теплопроводность образцов конечной длины вносят только те фононы, которые столкнутся с поверхностью образца в пределах его длины. А те фононы, которые столкнулись бы с поверхностью образца за пределами его длины, не вносят вклад в теплопроводность. Для этих фононов проекция длины пробега на ось *X*₃ определяется неравенством

$$\left|\Lambda_{3}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q})\right| \geq \frac{L}{2}.$$
(A.20)

Обозначим вклад этих фононов в теплопроводность $\Delta \kappa(T)$. Тогда теплопроводность стержня длиной *L* равна теплопроводности бесконечного стержня за вычетом $\Delta \kappa(T)$:

$$\kappa(T) = \kappa_{\infty}(T) - \Delta\kappa(T) . \tag{A.21}$$

Согласно [15], поправка $\Delta \kappa(T)$ для образца длиной *L* имеет вид:

$$\Delta\kappa(T) = \sum_{\lambda,q} {}^{*}\hbar\omega_{q}^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \cdot \frac{1}{2S_{c}} \int_{X_{1}} dX_{1} \left(\mathbf{m}(X_{1}) \mathbf{V}_{g}^{\lambda} \right) \left\{ \left| \Lambda_{3}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^{2} = \sum_{\lambda,q} {}^{*}\hbar\omega_{q}^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \Delta I^{\lambda}, \qquad (A.22)$$

$$\Delta I^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda} \right) \left\{ \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2.$$
(A.23)

Звездочка у знака суммирования по волновым векторам в формуле (А.22) означает, что в поправку $\Delta \kappa(T)$ вносят вклад только те фононы, для которых выполняется неравенство (А.20). При вычислении интеграла по контуру X_1 мы также должны учитывать неравенство (А.20). Из выражений (А.21) - (А.23) следует, что теплопроводность образцов конечной длины можно представить в виде:

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda,q} {}^{*}\hbar \omega_{q}^{\lambda} \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} I^{\lambda}(\theta,\varphi), \quad I^{\lambda}(\theta,\varphi) = I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi) - \Delta I^{\lambda}(\theta,\varphi).$$
(A.24)

Неравенство (А.20) накладывает ограничения на область интегрирования по волновым векторам в выражении для поправки к теплопроводности. Поэтому получить аналитические выражения

для величин $\Delta I^{\lambda}(\theta, \phi)$ и определить скорости релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах авторам [15] не удалось. Расчет теплопроводности для образцов кремния бесконечной длины в режиме граничного рассеяния был выполнен численным методом только для симметричных направлений при температуре 3 К.

Для расчета температурных зависимостей теплопроводности необходимо прежде всего определить скорости релаксации фононов для всех актуальных процессов рассеяния (включая рассеяние фононов на границах образца) и найти полную скорость релаксации согласно правилу Маттиссена. Это позволит исследовать изменение вкладов различных колебательных мод в теплопроводность с ростом температуры, а также проанализировать зависимости релаксационных характеристик от направлений градиента температуры. Представим некоторые детали расчета релаксационных функций $\Delta I^{\lambda}(\theta, \phi)$ при диффузном рассеянии фононов на границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями (см. [36, 37]).

Для цилиндрического образца длиной *L* при вычислении контурного интеграла:

$$\Delta I^{\lambda} = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda} \right) \left\{ \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2$$
(A.25)

воспользуемся рисунком А.3 и определим входящие в него величины (см. (А.4)):

$$\Lambda_{3}^{\lambda}(X_{1},\mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} 2R\cos(\phi - \gamma_{1}), \quad \left(\mathbf{m}(X_{1})\mathbf{V}_{g}^{\lambda}\right) = V_{g\perp}^{\lambda}\cos(\phi - \gamma_{1})$$
(A.26)

Подставим выражение (А.4) в неравенство $|\Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})| \ge L/2$, тогда получим:

$$\Delta^{\lambda} = \frac{L}{4\mathrm{R}} \frac{V_{g\perp}^{\lambda}}{\left|V_{g3}^{\lambda}\right|} < 1.$$
(A.27)

Вычисление интеграла (А.25) с условием (А.27) проводится аналогично случаю образцов бесконечной длины (см. рисунок А.3) и дает следующий результат

$$\Delta I^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{3}{2} I^{\lambda}_{x}(\theta,\varphi) \left[\left(1 + \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2} \right) \sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} \right)^{3} - \varDelta^{\lambda} \left(\arccos \varDelta^{\lambda} + \varDelta^{\lambda} \sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} \right) \right].$$
(A.28)

При выполнении противоположного неравенства $\Delta^{\lambda}(\theta, \varphi) > 1$ величина $\Delta I^{\lambda}(\theta, \varphi) = 0$, тогда $I^{\lambda}(\theta, \varphi) = I^{\lambda}(\theta, \varphi)$. Таким образом для функции $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$ имеем [36]:

$$I^{\lambda}(\theta,\varphi) = \begin{cases} \frac{4R(V_{g3}^{\lambda})^{2}}{\pi V_{g\perp}^{\lambda}} \left[1 - \left(1 + \left(\Delta^{\lambda}\right)^{2}\right) \sqrt{1 - \left(\Delta^{\lambda}\right)^{2}} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\Delta^{\lambda}\right)^{2}}\right)^{3} + \Delta^{\lambda} \left(\arccos\Delta^{\lambda} + \Delta^{\lambda} \sqrt{1 - \left(\Delta^{\lambda}\right)^{2}}\right) \right], \\ \text{если } \Delta^{\lambda}(\theta,\varphi) \le 1; \\ I_{\infty}^{\lambda}(\theta,\varphi), \text{ если } \Delta^{\lambda}(\theta,\varphi) > 1. \end{cases}$$
(A.29)

Из проведенного выше анализа видно, что при аналитическом расчете величины $\Delta I^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$ для образцов конечной длины с круглым сечением ограничения, накладываемые условием (A.20), в выражениях для теплопроводности (A.21) и (A.22) сводятся к системе неравенств между геометрическим параметром $k_0 = L/2D$ и отношениями компонент групповой скорости фононов. Поскольку эти неравенства могут быть включены в определение релаксационных функций $\Delta I^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$, то мы получаем возможность определить скорости релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины в соответствии с выражением:

$$v_B^{\lambda}(\theta,\varphi) = \frac{\left(V_{g^3}(\theta,\varphi)\right)^2}{I^{\lambda}(\theta,\varphi)}.$$
(A.30)

Из выражения (А.29) следует, что скорость релаксации фононов на границах цилиндрических образцов можно представить в виде кусочно-гладких функций:

$$v_{B}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \begin{cases} \frac{\pi V_{g\perp}^{\lambda}}{4R} \left[1 - \left(1 + \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2} \right) \sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} \right)^{3} + \varDelta^{\lambda} \left(\arccos \varDelta^{\lambda} + \varDelta^{\lambda} \sqrt{1 - \left(\varDelta^{\lambda} \right)^{2}} \right) \right]^{-1}, \\ \text{если } \varDelta^{\lambda}(\theta,\varphi) \le 1; \\ \left(3\pi / 8R \right) \sqrt{\left(V_{g}^{\lambda} \right)^{2} - \left(V_{g3}^{\lambda} \right)^{2}}, \text{если } \varDelta^{\lambda}(\theta,\varphi) > 1. \end{cases}$$
(A.31)

При выполнении неравенства $\Delta^{\lambda}(\theta, \phi) > 1$ величина $\Delta I^{\lambda}(\theta, \phi) = 0$, и $V_{B}^{\lambda}(\theta, \phi)$ определяется выражением (А.13) для цилиндрических образцов бесконечной длины.

Далее рассмотрим кнудсеновское течение фононного газа в образцах длины *L* с прямоугольным поперечным сечением *D*×µ*D*. Вычисление контурного интеграла

$$\Delta I^{\lambda} = \frac{1}{2S_c} \int_{X_1} dX_1 \left(\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^{\lambda} \right) \left\{ \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| - \frac{L}{2} \right\}^2 \quad \text{при} \quad \left| \Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q}) \right| \ge \frac{L}{2}.$$
(A.32)

производится аналогично случаю образцов бесконечной длины (см. рисунок А.4). При интегрировании по контуру X_1 выделим три области «А», «В» и «С» (см. рисунок А.4). Следует отметить, что контурные интегралы по dX_1 в формулах (А.25) и (А.32) вычисляются не по всему прямоугольному контуру, как указано в [15], а захватывают только его половину (см. [38]). Для области «А» (см. рисунок А.4) из неравенства $|\Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})| \ge L/2$ можно получить следующее ограничение на область интегрирования:

$$0 \le x \le x_{\max} , \quad x_{\max} = D - \frac{L}{2} \cdot \frac{V_{g\perp}^{\lambda} \cos \phi}{V_{g3}^{\lambda}} = D \left(1 - k_0 \cdot \frac{V_{g1}^{\lambda}}{V_{g3}^{\lambda}} \right), \quad k_0 = \frac{L}{2D} .$$
(A.33)

Учитывая (А.32) и (А.33), для интеграла по области «А» получим:

$$\Delta I_{\lambda}(A) = \frac{1}{2S_c} \int_{0}^{x_{\text{max}}} V_{g\perp}^{\lambda} \cdot \sin \phi \left\{ \left| \frac{D - x}{\cos \phi} \cdot \frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g\perp}^{\lambda}} \right| - L/2 \right\}^2 dx.$$
(A.34)

Из условия $x_{\max} > 0$ следует, что в рассматриваемом случае ($tg\phi = |V_{g2}/V_{g1}| < \mu$) неравенство $|\Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})| \ge L/2$ сводится к следующему соотношению между компонентами групповой скорости и геометрическим параметром k_0 :

$$\left| V_{g3}^{\lambda} / V_{g1}^{\lambda} \right| \ge k_{0}$$
(A.35)

Непосредственный расчет интеграла $\Delta I_{\lambda}(A)$ приводит к результату:

$$\Delta I_{\lambda}(A) = \frac{D}{6\mu} \left\{ \frac{\left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}}{\left|V_{\perp}^{\lambda}\right|} \cdot \frac{1}{\cos^{2}\phi} - k_{0} \cdot \left|V_{g3}^{\lambda}\right| \cdot \frac{1}{3\cos\phi} + \frac{(k_{0})^{2}}{3} \left|V_{\perp}^{\lambda}\right| - (k_{0})^{3} \cdot \frac{(V_{\perp}^{\lambda})^{2}}{\left|V_{g3}^{\lambda}\right|} \cdot \cos\phi \right\}.$$
(A.36)

Нетрудно убедиться, что при интегрировании по областям «В» и «С» неравенство $|\Lambda_3^{\lambda}(X_1, \mathbf{q})| \ge L/2$ также сводится к выражению (А.35). Непосредственный расчет интегралов по областям «В» и «С» дает

$$\Delta I_{\lambda}(B) = \frac{D}{2\mu} \left\{ \frac{\left(V_{g_{3}}^{\lambda}\right)^{2}}{\left|V_{g_{\perp}}^{\lambda}\right|} \cdot \frac{1}{\cos\phi} - 2k_{0} \cdot \left|V_{g_{3}}^{\lambda}\right| + k_{0}^{2} \cdot \left|V_{g_{\perp}}^{\lambda}\right| \cdot \cos\phi \right\} (\mu - tg\phi), \quad \Delta I_{\lambda}(C) = \Delta I_{\lambda}(A).$$
(A.37)

Просуммируем по всем трем областям и учтем, что $tg\phi = |V_{g2}^{\lambda}|/|V_{g1}^{\lambda}|$. Тогда при выполнении неравенств $|V_{g2}^{\lambda}| < \mu |V_{g1}^{\lambda}|$ и $|V_{g1}^{\lambda}| \geq k_0$ получим

$$I^{\lambda}(\theta,\varphi) = I^{\lambda}_{\infty}(\theta,\varphi) - \Delta I^{\lambda}(\theta,\varphi) = Dk_{0} \left| V^{\lambda}_{g3} \right| \left\{ 1 - \frac{k_{0}}{2\mu} \frac{\left| V^{\lambda}_{g2} \right| + \mu \left| V^{\lambda}_{g1} \right| \right)}{\left(V^{\lambda}_{g3} \right)} + \frac{(k_{0})^{2}}{3\mu} \frac{\left| V^{\lambda}_{g1} \right| \left| V^{\lambda}_{g2} \right|}{\left(V^{\lambda}_{g3} \right)^{2}} \right\}.$$
 (A.38)

При выполнении неравенств $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^{\lambda}| < \mu |V_{g1}^{\lambda}|$ выражение для $I^{\lambda}(\theta, \phi)$) в точности совпадает с (А.38). Если $(|V_{g3}^{\lambda}|/|V_{g1}^{\lambda}| < k_0$ и $|V_{g2}^{\lambda}| < \mu |V_{g1}^{\lambda}|)$ или $(|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^{\lambda}| > \mu |V_{g1}^{\lambda}|)$, то $\Delta I^{\lambda}(\theta, \phi) = 0$, и функции $I^{\lambda}(\theta, \phi)$ определяются выражениями (А.9) и (А.10), полученными для образцов бесконечной длины. Для перехода к образцам с квадратным сечением достаточно в формулах (А.9), (А.10) и (А.38) положить $\mu = 1$.

Из проведенного выше анализа видно (см. формулу (А.38)), что ограничения, накладываемые условием (А.20), для образцов конечной длины с прямоугольным сечением также могут быть включены в определение функций $\Delta I^{\lambda}(\theta, \varphi)$ и $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$. Поэтому мы получаем возможность определить скорости релаксации фононов различных поляризаций для образцов с прямоугольным сечением. Выражения для них имеют следующий вид [37]:

$$\mathcal{V}_{B}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \begin{cases}
 \frac{\left|V_{g3}^{\lambda}\right|}{k_{0}D} \left\{1 - \frac{k_{0}}{2} \frac{\left(V_{g2}^{\lambda}\right| + \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right|\right)}{\mu \left|V_{g3}^{\lambda}\right|} + \frac{(k_{0})^{2}}{3} \frac{\left|V_{g1}^{\lambda}\right| \left|V_{g2}^{\lambda}\right|}{\mu \left(V_{g3}^{\lambda}\right)^{2}}\right\}^{-1}, \\
 \mathcal{V}_{B}^{\lambda}(\theta,\varphi) = \begin{cases}
 \operatorname{если} \left|\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}}\right| \ge k_{0} \quad \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right| > \left|V_{g2}^{\lambda}\right| \quad \text{или} \quad \left|\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g2}^{\lambda}}\right| \ge \frac{k_{0}}{\mu} \quad \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right| < \left|V_{g2}^{\lambda}\right|; \\
 \mathcal{V}_{B\infty}^{\lambda}, \quad \text{если} \quad \left|\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g1}^{\lambda}}\right| < k_{0} \quad \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right| > \left|V_{g2}^{\lambda}\right| \quad \text{или} \quad \left|\frac{V_{g3}^{\lambda}}{V_{g2}^{\lambda}}\right| < \frac{k_{0}}{\mu} \quad \mu \left|V_{g1}^{\lambda}\right| < \left|V_{g2}^{\lambda}\right|. \end{cases}$$
(A.39)

Для перехода к образцам с квадратным сечением достаточно в формуле (А.39) положить $\mu = 1$. Итак, при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями скорости релаксации фононов определяются кусочно-гладкими функциями углов θ и φ , которые определяются соотношениями между компонентами групповых скоростей фононов и геометрическими параметрами образцов.

Выражения для длин свободного пробега Λ и Λ^{λ} в образцах конечной длины отличаются от случая образцов бесконечной длины (см. формулу (А.19)) только определением функции $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$:

$$\Lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda 1} \left\langle \left(S^{\lambda 1}\right)^{-2} \right\rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^{1} dx \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{\left(S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^{3}}, \tag{A.40}$$

$$\Lambda^{\lambda} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\left\langle \left(S^{\lambda}\right)^{-2} \right\rangle} \int_{-1}^{1} dx \int_{0}^{2\pi} d\varphi \ \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{\left(S^{\lambda}(\theta, \varphi)\right)^{3}}, \ x = \cos\theta, \tag{A.41}$$

где релаксационные функции $I^{\lambda}(\theta, \phi)$ для образцов длиной *L* с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями определяются формулами (А.5), (А.9), (А.10) и (А.38). Как и в случае образцов бесконечной длины, для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума они выражаются через двукратный угловой интеграл.

Из формул (А.39) и (А.40) следует, что коэффициенты теплопроводности $\tilde{\kappa}(T) = \kappa(T)/D$ и, соответственно, длины свободного пробега $\tilde{\Lambda} = \Lambda(L, W, D)/D$, нормированные на толщину пленки *D*, зависят не от трех геометрических параметров образца (*D*, *W* и *L*), а только от двух отношений параметров $\mu = W/D$ и $k_0 = L/2D$:

$$\kappa(T, L, W, D) = D\tilde{\kappa}(T, k_0, \mu), \quad \Lambda(L, W, D) = D \cdot \tilde{\Lambda}(k_0, \mu).$$
(A.42)

Очевидно, что для образцов с квадратным сечением длины пробега фононов, нормированные на сторону сечения D, зависят только от параметра k_0

$$\Lambda(L, D, D) = D \cdot \widehat{\Lambda}(k_0) \,. \tag{A.43}$$

Формулы (А.42) и (А.43) представляют интерес для экспериментальной проверки применимости нашей теории при исследовании фононного транспорта в упруго анизотропных кристаллах.

А.3 Анизотропия длин свободного пробега фононов в образцах кремния с круглым и квадратным сечениями при низких температурах

Рассмотрим фононный транспорт в объемных образцах кремния при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда доминирует рассеяние фононов на границах. Сравним результаты расчета длин пробега фононов в модели анизотропного континуума с экспериментальными данными [15] для симметричных направлений. Из газокинетической формулы для теплопроводности $\kappa = 1/3C_V \bar{S} \Lambda$ следует, что анизотропия теплопроводности определяется длиной свободного пробега фононов Λ , поскольку удельная теплоемкость C_V и средняя скорость фонона \bar{S} не зависят от направления потока тепла. Проанализируем сначала длины свободного пробега фононов в модели изотропной среды и убедимся, что в предельном случае образцов бесконечной длины из наших формул (A.5), (A.9) и (A.10) следуют известные результаты для длин Казимира $\Lambda_C = \Lambda_{\pi}$.

В изотропных средах фазовые скорости фононов S^{λ} не зависят от углов θ и φ , а направления фазовой и групповой скоростей совпадают $V_{gi}^{\lambda} = S^{\lambda}n_i$, где $\mathbf{n} = \mathbf{q}/\mathbf{q} = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}$ - единичный волновой вектор. Поэтому из формул (A.40) -(A.41) следует, что длины пробега фононов различных поляризаций равны друг другу и средней длине пробега:

$$\Lambda^{L} = \Lambda^{t} = \Lambda = D \frac{3}{4\pi} \cdot \int d\Omega_{q} \tilde{I} (\theta, \varphi), \quad \tilde{I} (\theta, \varphi) = \frac{I^{\lambda}(\theta, \varphi)}{DS^{\lambda}}, \quad \tilde{\Lambda} = \Lambda / D.$$
(A.44)

Для образцов с круглым сечением и длиной L функции \tilde{I} (θ, ϕ) преобразуются к виду:

$$\widetilde{I}(\theta) = \frac{4}{3\pi} \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta}, \quad npu \ \Delta \ge 1, \quad \Delta = \frac{L}{4R} tg \theta , \qquad (A.45)$$

$$\widetilde{I}(\theta) = \frac{4}{3\pi} \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[\left(1 + \Delta^2 \right) \sqrt{1 - \Delta^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \Delta^2} \right)^3 - \Delta \left(\arccos \Delta + \Delta \sqrt{1 - \Delta^2} \right) \right] \right\}, \quad npu \ \Delta < 1.$$
(A.46)

Для стержней бесконечной длины с круглым сечением релаксационная функция $\tilde{I}(\theta, \phi)$ определяется выражением (А.45). Расчет интеграла (А.44) дает:

$$\Lambda_C = \Lambda_{\infty} = 2R \cdot \frac{3}{4\pi} \cdot 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \frac{4}{3\pi} \frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} = 2R.$$
(A.47)

Таким образом, для диэлектрического стержня бесконечной длины с круглым сечением следует результат Казимира [15]: длина свободного пробега фононов равна его диаметру.

Для образцов с квадратным сечением со стороной *D* и длиной *L* релаксационные функции (А.9), (А.10) и (А.38) преобразуются к виду:

$$\widetilde{I}(\theta,\varphi) = \begin{cases} \left(n_3 / n_1\right)^2 \left(3|n_1| - |n_2|\right) / 6, & \text{если } |n_1| > |n_2| \text{ и} |n_3 / n_1| < k_0, \\ \left(n_3 / n_2\right)^2 \left(3|n_2| - |n_1|\right) / 6, & \text{если } |n_1| < |n_2| \text{ и} |n_3 / n_2| < k_0; \end{cases}$$
(A.48)

$$\widetilde{I}(\theta,\varphi) = k_0 \left| n_3 \right| \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{\left| n_2 \right| + \left| n_1 \right|}{\left| n_3 \right|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{\left| n_1 \right| \left| n_2 \right|}{(n_3)^2} \right\}, \text{ если } \begin{cases} \left(n_1 \right| > \left| n_2 \right| \mathbf{H} \left| n_3 \right| n_1 \right| \ge k_0 \end{cases}$$

$$(A.49)$$

Подставим формулу (А.48) в выражение (А.44) для длины Казимира в образцах с квадратным сечением, тогда получим известный результат (см., например, [31]):

$$\Lambda_{C} = \frac{D}{\pi} \int_{0}^{\pi} \cos^{2}\theta d\theta \int_{0}^{\pi/4} d\varphi \left(\frac{3}{\cos\varphi} - \frac{\sin\varphi}{\cos^{2}\varphi}\right) = \frac{D}{2} \left[3\ln\left(\sqrt{2} + 1\right) - \sqrt{2} + 1\right] \approx 1.115 D.$$
(A.50)

Из выражений (А.44)-(А.50) следует, что длины пробега фононов в изотропных средах не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими размерами образцов. Поэтому эти результаты могут быть использованы в качестве удобной системы сравнения для зависимостей длин пробега фононов различных колебательных мод в упруго анизотропных кристаллах, которые зависят не только от геометрических параметров образцов, но и от направления теплового потока в кристалле.

Проанализируем угловые зависимости длин свободного пробега фононов при рассеянии на границах для образцов кремния с круглым и квадратным сечением при низких температурах. Спектр и групповые скорости фононов определим в системе координат по ребрам куба. Рассмотрим вращение потока тепла (оси образца) в двух плоскостях: (1) в плоскости грани куба YZ; и (2) в диагональной плоскости. Пусть угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z, направленной по ребру куба. Определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока.

(1)
$$\nabla_r T = \{\nabla_x T, 0, \nabla_z T\} = |\nabla_r T| \{0, -\sin\psi, \cos\psi\}, \quad V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin\psi + V_{gz}^{\lambda} \cos\psi$$
, (A.51)

(2)
$$\nabla_r T = \left\{ \nabla_x T, \nabla_y T, \nabla_z T \right\} = \left| \nabla_r T \right| \left\{ -\sin \psi / \sqrt{2}, \sin \psi / \sqrt{2}, \cos \psi \right\}, \quad V_{g3}^{\lambda} = \left(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda} \right) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi .$$
(A.52)

Зависимости $\Lambda_{g}(\psi)$ от угла ψ будут определяться зависимостями компонент групповой скорости фононов V_{g1}^{λ} , V_{g2}^{λ} и V_{g3}^{λ} , входящих в релаксационные функции $I^{\lambda}(\theta, \varphi)$. Для цилиндрических образцов достаточно задать компоненту групповой скорости фононов, параллельную тепловому
потоку. Для рассматриваемых случаев вращения градиента температуры в плоскости грани куба или диагональной плоскости имеем

(1)
$$V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi$$
, $V_{g\perp}^{\lambda} = \sqrt{(V_{g3}^{\lambda})^{2} - (V_{g3}^{\lambda})^{2}}$, (A.53)
(2) $V_{g3}^{\lambda} = (-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi$.

Компоненты групповой скорости фононов в декартовой системе координат имеют вид

$$V_{gx}^{\lambda}(\theta,\varphi) = S^{\lambda}(\theta,\varphi) \{\sin\theta\cos\varphi + S_{\theta}^{\lambda}\cos\theta\cos\varphi - S_{\varphi}^{\lambda}\sin\varphi\},$$

$$V_{gy}^{\lambda}(\theta,\varphi) = S^{\lambda}(\theta,\varphi) \{\sin\theta\sin\varphi + S_{\theta}^{\lambda}\cos\theta\sin\varphi + S_{\varphi}^{\lambda}\cos\varphi\},$$

$$V_{gz}^{\lambda}(\theta,\varphi) = S^{\lambda}(\theta,\varphi) \{\cos\theta - S_{\theta}^{\lambda}\sin\theta\}.$$
(A.54)

Для анализа угловых зависимостей выберем ориентацию граней следующим образом. В случае вращения градиента температур в плоскости грани куба YZ ось X остается стационарной, поэтому одну из боковых граней возьмем перпендикулярной оси X: $V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}$. В качестве направления V_{g2}^{λ} возьмем ось, лежащую в плоскости YZ и перпендикулярную градиенту температуры

$$V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos \psi + V_{gz}^{\lambda} \sin \psi \,. \tag{A.55}$$

В случае вращения градиента температуры в диагональной плоскости стационарной осью является направление [110], перпендикулярное этой плоскости. Поэтому выберем его в качестве направления V_{g1}^{λ}

$$V_{g1}^{\lambda} = \left(V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right) / \sqrt{2} .$$
 (A.56)

В качестве направления V_{g2}^{λ} выберем ось, лежащую в диагональной плоскости и перпендикулярную градиенту температур

$$V_{g2}^{\lambda} = \left(-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}\right)\cos\psi / \sqrt{2} - V_{gz}^{\lambda}\sin\psi.$$
(A.57)

Проанализируем угловые зависимости длин Казимира для образцов Si с круглым и квадратным сечениями, рассчитанные по формулам (А.17) и (А.19). При равенстве площадей квадратного и круглого сечений ($D^2 = \pi R^2$), нормируем длины Казимира Λ_c на сторону основания D для образца с квадратным сечением ($\tilde{\Lambda}_c(\psi) = \Lambda_c(\psi)/D$) и на $\sqrt{\pi R}$ для образца с круглым сечением радиусом R ($\tilde{\Lambda}_c(\psi) = \Lambda_c(\psi)/\sqrt{\pi R}$). В этом случае отличие угловых зависимостей длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_c(\psi)$ для образцов с круглым и квадратным сечением не превышает 1%. Для рассматриваемых случаев максимальное отклонение длин свободного

пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{C}^{\lambda}(\psi)$ не превышает 1.6% для быстрой поперечной моды. В масштабе рисунка A.5 эти кривые неразличимы. Поэтому рисунок A.5 относится фактически к образцам бесконечной длины как с круглым, так и с квадратным сечением.

Как видно из рисунка А.5а, в окрестности направлений [100] при углах $\psi = \pm 0.06 + n\pi/2$ (*n* – целое число) для медленной поперечной моды длина Казимира достигает максимальных значений. Она в 2 раза больше $\Lambda_C^{t_1}$ для быстрой поперечной моды и в 3 раза больше Λ_C^L для продольных фононов. При переходе к направлениям [110] ситуация меняется: длина Казимира медленной поперечной моды уменьшаются в 3 раза и принимает минимальные значения. В направлениях [110] длина Казимира для быстрой поперечной моды достигает максимальнх значений. Она в 2.8 и 1.6 раза больше, чем для медленных поперечных и продольных фононов, соответственно.



Рисунок А.5 – Угловые зависимости приведенных длин Казимира $\tilde{\Lambda}_{C}^{\lambda}(\psi) = \Lambda_{C}^{\lambda}(\psi)/D$ и $\tilde{\Lambda}_{C}(\psi) = \Lambda_{C}(\psi)/D$ для образцов Si с квадратным сечением в случаях, когда градиент температур вращается в плоскости грани куба (а) и диагональной плоскости (б): 1 — для быстрой поперечной моды, 2 —для медленной поперечной моды, 3 — для продольной моды, 4 — средняя длина Казимира, 5 – длина Казимира в модели изотропной среды.

Для направлений [111] максимальные значения длина Казимира достигает для продольных фононов. В этих направлениях она в 1.8 и 1.1 раза больше, чем для быстрых и медленных поперечных фононов, соответственно (см. рисунок А.5б). Для симметричных направлений отношение средних длин Казимира составляет $\Lambda_c^{(100)} : \Lambda_c^{(110)} : \Lambda_c^{(111)} = 1.74 : 1.2 : 1 \cdot 1.3$ сравнения результатов, полученных для кристаллов кремния и модели изотропной среды видно, что в направлениях фокусировки длины Казимира всех мод оказываются больше, а в направлениях дефокусировки меньше, чем для изотропной среды (см. рисунки А.5).

Использование выражений, полученных нами для длин свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния, позволило описать экспериментальные данные по анизотропии теплопроводности для образцов кремния с квадратным сечением при низких температурах [15]. На рисунке A.6 приведены угловые зависимости в образцах кремния длиной L=2.9 см с квадратным поперечным сечением D=0.293 см, рассчитанные по формулам (A.40) и (A.41). Для всех симметричных направлений результаты расчета хорошо согласуются с данными эксперимента [15]. Из рисунка A.6 видно, что длины свободного пробега фононов достигают максимальных значений для каждой колебательной моды в направлениях фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега остальных колебательных мод и длины пробега для модели изотропной среды. В направлениях дефокусировки они достигают минимальных значений и оказываются меньше, чем в модели изотропной среды. Так, например, фононы медленной t_2 -моды фокусируются в направлении [100], для них длина свободного пробега превосходит длины свободного пробега фононов достигают



Рисунок А.6 – Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}^{\lambda}(\psi) = \Lambda^{\lambda}(\psi)/D$ и $\tilde{\Lambda}(\psi) = \Lambda(\psi)/D$ для образцов Si (a, б) длиной L=2.9 см с квадратным сечением D=0.293 см в случаях, когда градиент температур лежит в плоскости грани куба (a) и в диагональной плоскости (б) кривые: 1 — для быстрой поперечной моды, 2 — для медленной поперечной моды, 3 — для продольной моды, 4 — средняя длина свободного пробега, 5 – длина свободного пробега в модели изотропной среды. Символы – экспериментальные данные [15].

и продольной мод в 1.6 раза и 2.4 раза, соответственно, а среднюю длину свободного пробега фононов в 1.3 раза. Фононы быстрой *t*₁-моды фокусируются в направлении [110], для них длина свободного пробега имеет максимальное значение. Она превосходит в этом направлении длины свободного пробега медленной *t*₂-моды в 1.5 раза и продольной моды в 1.2 раза, а также среднюю

длину пробега в 1.2 раза. Продольные фононы фокусируются в направлении [111], для этого направления длина свободного пробега заметно превышает длины свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении длины свободного пробега фононов медленной и быстрой поперечных мод уменьшаются относительно направления [100] в 1.8 и 1.5 раза, соответственно, в то время как для продольной моды Λ^L возрастает 1.5 раза. В результате длина свободного пробега продольных фононов оказывается больше в 1.6 и 1.2 раза, чем для быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении она превосходит среднюю длину свободного пробега фононов в 1.3 раза. Для симметричных направлений отношение средних длин свободного пробега фононов составляет $\Lambda^{[001]} \cdot \Lambda^{[101]} \cdot \Lambda^{[111]} = 1.50:1.08:1$. Таким образом, максимальные значения теплопроводность образцов кремния имеет для направления [100] и обеспечивается медленной t2-модой, а минимальное – для направления [111], где фокусируются L-фононы. Следует отметить, что рассчитанные величины теплопроводности кремния $\kappa_{theor}(T_0)$ и средних длин свободного пробега фононов превышают экспериментальные значения κ_{exp} (T_0) при $T_0 = 3$ К для направлений типа [100] на 4%, а для [110] и [111] – на 8% (см. рисунки А.6). Однако при этом в расчете не учитывали рассеяние фононов на изотопическом беспорядке. Как показано в монографии [38] (раздел 3.3), учет этого механизма позволит согласовать результаты расчета теплопроводности с экспериментом в интервале температур от 3 до 15 К для всех образцов, исследованных в [15], в пределах погрешности эксперимента.

Поскольку далее значительное внимание будет уделено исследованию влияния анизотропии упругой энергии на электронный и фононный транспорт в кристаллах калия и наноструктурах на его основе, то рассчитаем и сравним длины свободного пробега фононов при диффузном рассеянии на границах в монокристаллических образцах калия и кремния (см. рисунки А.6 и А.7). Кристаллы калия являются удобной модельной системой для таких исследований. Они имеют близкий к изотропному спектр электронов проводимости и аномально большой по сравнению с полупроводниковыми кристаллами параметр анизотропии упругой энергии: для них параметр анизотропии k-1 более чем в 3 раза больше, чем в кремнии (см. таблицу 1.1). Как видно из рисунков А.6 и А.7, несмотря на значительное отличие параметров анизотропии существенного изменения абсолютных значений длин пробега не происходит. Однако угловые зависимости длин пробега фононов различных поляризаций существенно изменяются. В образцах Si длины свободного пробега достигают максимальных значений в направлениях фокусировки для каждой моды. Однако в кристаллах калия из-за значительно больших величин параметр анизотропии k-1 абсолютные максимумы для моды t_2 достигаются не в направлениях фокусировки, а в направлениях, близких к направлениям групповых скоростей



Рисунок А.7 – Угловые зависимости длины свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{(I(\psi))}^{(J)2} = \Lambda_{(I(\psi))}^{(J)2} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{(I(\psi))}^{(J)} = \Lambda_{(I(\psi))}^{(J)} / D$ в кристаллах калия для образцов с квадратным сечением D = 0.293 см и длиной L = 2.9 см в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). 1 – быстрая t_1 -мода, 2 – медленная t_2 -мода, 3 – продольная мода, 4 – средняя длина свободного пробега. Пунктирная кривая 5 – для изотропной среды (Λ_{iso} =1.12 D).

в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях (см. рисунки А.6 и А.7). Так, например, для волновых векторов в плоскости грани куба длина пробега t_2 -моды в кристаллах Si имеет максимальные значения в направлениях типа [100], однако в кристаллах калия в этом направлении имеет место локальный минимум, а обсолютный максимум расположен при углах $\pi/4\pm0.23$. В отличие от t_2 -моды, для *L*-фононов направления максимумов и минимумов не изменяется: как для образцов Si, так и калия минимумы длин пробега достигаются в направлениях типа [100], а максимумы - в направлениях [111]. Для волновых векторов в плоскости {110} наиболее анизотропным в кристаллах калия является вклад продольных фононов. Его максимальные значения для кристаллов калия в направлениях [111] превышают минимальные в направлениях [100] в 2.3 раза, тогда как в кремнии - всего в 1.5 раза. Максимальный вклад в теплопроводность для образцов Si и калия с квадратным сечением вносит медленная t_2 -мода. Её вклад для Si составляет 53%, а для калия он возрастает до 78% благодаря росту теплоёмкости за счет t_2 -моды.

257