

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

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Екатеринбург – 2025

Диссертационная работа выполнена в лаборатории кинетических явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН).

**Официальные
оппоненты:**

1. Бычков Игорь Валерьевич
доктор физико-математических наук, профессор, профессор
кафедры радиофизики и электроники Челябинского государ-
ственного университета, г. Челябинск;
2. Каган Мирон Соломонович
доктор физико-математических наук, главный научный со-
трудник, заведующий лабораторией электронных процес-
сов в полупроводниковых материалах Института радиотех-
ники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва;
3. Кучинский Эдуард Зямович
доктор физико-математических наук, ведущий научный со-
трудник, заведующий лабораторией теоретической физики
Института электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург.

**Ведущая
организация:**

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Уральский федеральный
университет имени первого Президента России Б.Н. Ель-
цина», г. Екатеринбург.

Защита состоится 10 октября 2025 г. в 10:00 на заседании диссертационного совета
24.1.133.01 на базе ФГБУН Института физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
по адресу: 620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФМ УрО РАН и на сайте
www.imp.uran.ru.

Автореферат разослан _____ 2025 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Чарикова Татьяна Борисовна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

В связи с интенсивным развитием технологии изготовления и широким использованием нанопленок и нанопроводов в микроэлектронике значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств. 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 теплосоппротивлении наноструктур 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 Казимир¹ 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 Кнудсена², 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 коллегами³ 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 работе³ 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 работе⁴ 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 направлений 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. Поэтому фокусировка фононов может оказать существенное влияние не только на фононный транспорт, но и электрон-фононную релаксацию и явления электронного переноса в металлах.

¹ Casimir H. B. G. Note on the conduction of heat in crystals // Physica. 1938. V. 5. P. 495-500.

² Knudsen M. Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren // Annalen der Physik. 1909. V. 333. № 1. P. 75–130.

³ Berman R., Foster E. L. and Ziman J. M. Thermal Conduction in Artificial Sapphire Crystals at Low Temperatures. I. Nearly Perfect Crystals // Proc. R. Soc. Lond. 1955. V. A 231. P. 130.

⁴ Taylor B., Maris H.J. and Elbaum C. Phonon focusing in solids // Phys. Rev. Letter. 1969. V. 23. P. 416.

Экспериментальные исследования МакКарди и др.⁵ 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 на 40% меньше, чем в направлении [111]. Вторым эффектом является зависимость теплопроводности образцов с прямоугольным сечением при низких температурах от ориентации боковых граней. Для двух исследованных образцов⁵ Si, 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 $\kappa(T)$ длина свободного пробега фононов становится меньше поперечных размеров образца, теплопроводность кубических кристаллов становится изотропной — она не зависит от направления потока тепла.

В работе⁵ 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 авторам⁵ 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 [A25].

Теория явлений электронного переноса в металлах основывалась на работах Пайерлса⁶, Блоха⁷, Грюнайзена⁸. В этих работах, как и в последующем развитии теории в монографиях Вильсона⁹ и Займана¹⁰ для фононов была 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 компоненту¹¹. Поэтому в рамках стандартной теории потенциала деформации¹¹ они могут

⁵ McCurdy A. K., Maris H. J. and Elbaum C. Anisotropic heat conduction in cubic crystals in the boundary scattering regime // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. 4077.

⁶ Peierls R.E. Quantum Theory of Solids. Oxford at clarendon press, 1955.

⁷ Bloch F. Zum elektrischen Widerstandsgesetz bei tiefen Temperaturen // Zs. Fur Phys. 1930. V.59. P.208-214.

⁸ Gruneisen E. Die Änderung des Druckkoeffizienten des metallischen Widerstands mit der Temperatur // Ann. der Phys. 1941. V.40. P.543-552.

⁹ Wilson A.H. The Theory of Metals. ed., Cambridge, 1953.

¹⁰ Ziman J. Electrons and Phonons. Oxford, New York, 1960.

¹¹ Truel B., Elbaum C., Chick B.B. Ultrasonic methods in solid state physics. Academic Press, N. Y.—London, 1969.

взаимодействовать с электронами. Однако при расчетах электросопротивления металлов роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн не учитывали. Не рассматривали также эффекты, обусловленные анизотропией фононного спектра в металлах на электрон-фононную 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 [A27].

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 CaF_2 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.

Научная новизна работы: 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.

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 ди-

электрических 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 металлах. Это позволило проанализировать роль квазипоперечных фононов и сдвиговых волн в этих эффектах. Показано, что при температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T \ll \theta_D$, квазипоперечные фононы, которые ранее не учитывали, 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: $\alpha_{drag} \sim B_2 T^4$ и $\kappa(T) \sim C T^3$. Для поперечных размеров $D > 10^{-2}$ см доминируют объёмные механизмы релаксации фононов: термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность становятся изотропными и следуют асимптотикам: $\alpha_{drag}(T) \sim A T^3$ и $\kappa(T) \sim B T^2$. 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 CaF_2 , 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 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 при низких температурах $T \ll \theta_D$ 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 коэффициентов, характеризующих электронный и фононный транспорт в металлических 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 диэлектрических 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 длины позволил количественно описать температурные 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 объемных 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 взаимодействия⁵⁻¹⁰ приводили к расхождению результатов расчета и экспериментальных данных для электросопротивления БМ в 2-3 раза уже при температуре 300K. Мы учли релаксацию электронов на квазипоперечных фононах, а константы взаимодействия электронов со сдвиговыми волнами определили из данных по электросопротивлению БМ в высокотемпературной области ($T \gg \theta_D$). Предложенный метод определения констант взаимодействия основан на интересной и очень простой идее, высказанной Займаном¹⁰, который показал, что в области высоких температур при $T \gg \theta_D$, 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 (Екатеринбург, Россия 2019), XXIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, Россия 2023), Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2015, 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 в трех монографиях.

Структура и объем диссертации.

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

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, представлены цели и задачи исследования, изложена новизна и практическая значимость работы, отмечен личный вклад автора. Описаны основные положения, выносимые на защиту, представлена структура диссертации.

В первой главе проанализированы динамические характеристики упругих волн в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии. При ис-

следовании физических процессов, определяющих электронный и фононный транспорт в объемных материалах и наноразмерных образцах, 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 кристаллах и в наноструктурах на их основе. При низких температурах, когда волновой вектор фонона гораздо меньше дебаевского волнового вектора, адекватным приближением для спектра и векторов поляризации фононов в кубических кристаллах является модель анизотропного континуума. В этой модели упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями упругости второго порядка³, которые для большинства кристаллов экспериментально определены (см. таблицу 1).

Анизотропия упругой энергии приводит к ряду новых эффектов в распространении упругих волн и фононном транспорте в кубических кристаллах. Во-первых, в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, т.е. у всех колебательных мод имеются и продольные, и поперечные компоненты. Анализ векторов поляризаций фононов в кубических кристаллах показал, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания для кубических кристаллов мал, и им можно пренебречь [A1]. 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 [A1], показал, что 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), который входит в уравнения Кристоффеля, могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной $k-1 > 0$ (тип I) и отрицательной $k-1 < 0$ (тип II) анизотропией упругих свойств (см. таблицу 1). Физической причиной такого разделения послужил анализ фокусировки фононов: в работе [A1] показано, что в кристаллах одного типа направления фокусировки и дефокусировки фононов совпадают, тогда как в кристаллах различного типа они противоположны: направления фокусировки в кристаллах первого типа становятся направлениями дефокусировки в кристаллах второго типа. Этот эффект приводит к качественному изменению анизотропии теплопроводности в кристаллах первого и второго типа. Поскольку в упруго анизотропных кристаллах максимальные значения плотности фононных состояний (ПФС) достигаются в направлениях фокусировки, а минимальные - в направлениях дефокусировки, то направления максимумов ПФС в кристаллах первого типа становятся направлениями минимумов в кристаллах второго типа. В работе [A1] показано, что к первому типу ($k-1 > 0$) относятся диэлектрические кристаллы Ge, Si, алмаз, GaSb и т.д., а также щелочные - Na, Li, K, Rb, Cs и благородные металлы Au, Ag и Cu, и ряд других (см. таблицу 1). Ко второму типу кубических кристаллов ($k-1 < 0$) относятся кристаллы KCl, NaCl, и т.д., а также металлы Mo и W, (см. таблицу 1). Расчет спектра и векторов поляризации фононов показал, что анизотропия этих эффектов в щелочных и благородных металлах значительно больше, чем для диэлектрических кристаллов. Вектора поляризации медленной t_2 -моды для них имеют

Таблица 1 – Упругие модули второго порядка c_{ij} (10^{12} дин/см²), плотность ρ (г/см³) и классификация кубических кристаллов в соответствии с параметром анизотропии $k-1$.

Тип	Кристалл	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ρ	$k-1$	Степень ионности связи
I	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	
	K	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
	CaF ₂	1.74	0.56	0.359	3.211	-0.33	0.89
	SrF ₂	1.24	0.43	0.31	2.44	-0.204	0.89
	YIG	2.69	1.077	0.764	5.17	-0.04	
	Mo	4.6	1.76	1.1	10.19	-0.183	металл
	W	5.01	1.98	1.514	19.2	-0.001	

аномально большую продольную компоненту по сравнению с полупроводниковыми кристаллами типа Ge и Si: для кристаллов Na, Li и K эта компонента достигает, 70% и 60%, 30%, соответственно. Как мы увидим далее, это приведет к значительно большему влиянию медленной t_2 -моды на электрон-фононную релаксацию, электросопротивление и термоэдс увлечения в щелочных и благородных металлах.

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

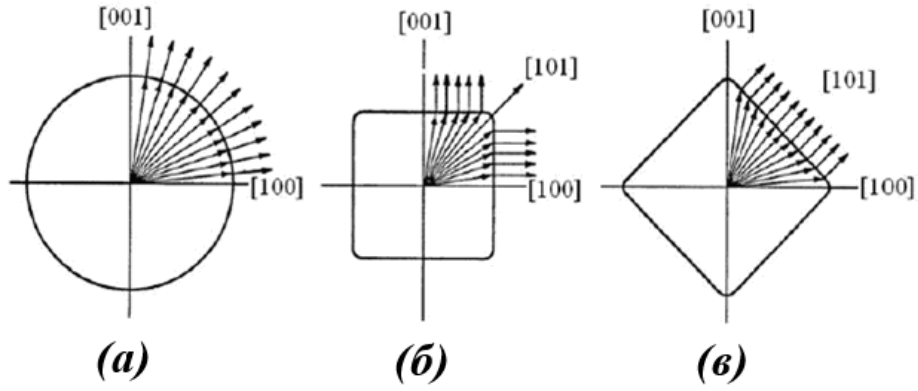


Рисунок 1 – Схема сечений изоэнергетических поверхностей, иллюстрирующая фокусировку фононов: (а) – изотропный случай, (б) – фокусировка в направлении [100], (с) – фокусировка в направлении [101].

(см. рисунок 1 а). В анизотропных кристаллах направление распространения фононов определяется групповой скоростью. Для произвольного направления волнового вектора она может быть представлена в виде¹²:

$$\mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi) = S^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi), \quad \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi) = \mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi,$$

$$S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \theta}, \quad S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \varphi}, \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_\theta = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$, $\mathbf{n}$ – единичный волновой вектор фонона. Векторы $\mathbf{n}$, $\mathbf{e}_\theta$ и $\mathbf{e}_\varphi$ образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов. В качестве примера 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. [A27]). Для определения влияния фокусировки фононов на направления групповых скоростей фононов необходимо построить изоэнергетические поверхности или поверхности постоянной частоты

$$\mathbf{q} = \mathbf{n} \cdot \omega^\lambda / S^\lambda(\theta, \varphi). \quad (2)$$

Очевидно, что вектор групповой скорости $\mathbf{v}_g^\lambda$ будет ортогонален изоэнергетической поверхности. Это позволяет однозначно сопоставить волновым векторам фононов соответствующие направления $\mathbf{v}_g^\lambda$. Для иллюстрации этого эффекта на рисунке 1 приведены три случая изоэнергетической поверхности: первый случай соответствует модели изотропной среды, а в случаях (б) и (в) поверхности постоянной частоты в сечении {100} имеют вид квадрата со сторонами, перпендикулярными направлениям типа [100] и [101]. Поэтому групповая скорость фононов, перпендикулярная изоэнергетической поверхности, будет направлена вдоль [100] в случае (б) и вдоль [101] – в случае (в). Очевидно, что в случае (б) фононы фокусируются в направлениях типа [100] и дефокусируются в [101]. В случае (в) наоборот: фокусировка фононов происходит в направлениях [101], а дефокусировка – в [100].

¹² Kuleyev I.G., Kuleyev I.I., Arapova I.Yu. Interaction of collinear and noncollinear phonons in anharmonic scattering processes and their role in ultrasound absorption of fast quasi-transverse modes in cubic crystals // J. Phys.: Condens. Matter. 2010. V.22. №9. P.095403-095421.

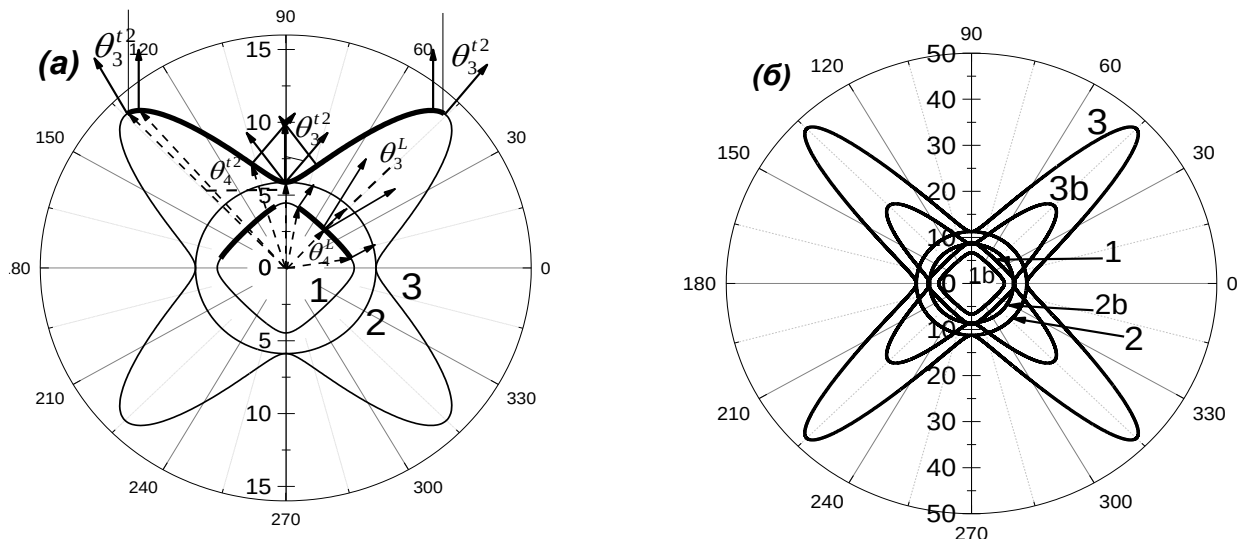


Рисунок 2 – Угловые зависимости изоэнергетических поверхностей (10^{-5} с/см) для кристаллов: (а) К и (б) Cs (кривые 1, 2, 3) и Rb (кривые 1b, 2b, 3b). Для продольных – кривые 1, быстрых – кривые 2 и медленных поперечных фононов – кривые 3: (а, в, д) для волновых векторов в плоскости грани куба.

Для иллюстрации фокусировки фононов в щелочных металлах построим изоэнергетические поверхности всех мод для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ (см. рисунок 2). Как видно из сравнения рисунков 1 и 2, наиболее заметным эффектом для щелочных металлов является влияние фокусировки на распространение продольных фононов. Аномально большие значения параметра анизотропии $k-1$ для щелочных металлов (см. таблицу 1) приводят к тому, что распределение групповых скоростей для L -фононов в щелочных металлах становится подобным распределению (с) на рисунке 1. 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, также и для других технических приложений. С другой стороны, из сравнения изоэнергетических поверхностей для всех мод видно, что анизотропия медленной t_2 -моды имеет максимальные значения: при одной и той же энергии фононов в кристаллах Na, K, Rb и Cs волновые векторы медленной t_2 -моды в направлениях $[101]$ оказываются больше, чем для продольных фононов, в 4, 3.9, 4.4 и 6.7 раза, соответственно (см. рисунок 2). Для БМ это отношение составляет от 3 до 4. Как мы увидим далее, это приведет к доминирующей роли t_2 -моды в электрон-фононной релаксации и электросопротивлении щелочных благородных металлов при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, а также окажет значительное влияние на анизотропию электронного транспорта и термоэдс увлечения в наноструктурах на основе щелочных и благородных металлов.

Сравнение рассчитанных коэффициентов усиления потока фононов для металлических и диэлектрических кристаллов показало, что для кубических кристаллов одного типа угловые зависимости ПФС и коэффициентов усиления качественно не изменяются: положения максимумов и минимумов не изменяются.

Во второй главе развит метод расчета температурных зависимостей теплопроводности монокристаллических образцов при учете эффекта фокусировки фононов.

В рамках стандартной схемы^{13,14} учтено влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на решеточную теплопроводность кубических кристаллов в трехмодовой модели Каллавея с учетом анизотропии упругой энергии. Показано, что использование рассчитанных нами скоростей релаксации фононов на границах образцов конечной длины с квадратным и прямоугольным сечением позволяет адекватно описать экспериментальные данные по теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образца без использования подгоночных параметров (см рисунок 3). Подгонку результатов осуществляли вариацией параметров ангармонических процессов рассеяния для того, чтобы добиться наилучшего совпадения результатов расчёта $\kappa(T)$ и экспериментальных данных в области максимума $\kappa(T)$. Отметим, что в области максимума теплопроводности существенную роль играют процессы фонон-фононного переброса. Как видно из рисунка 3, развитая нами теория корректно описывает анизотропию и температурные зависимости теплопроводности для образцов кремния с квадратным сечением, т. е. первый из обнаруженных в работе⁵ эффектов МакКарди. Он заключается в зависимости теплопроводности образцов кремния с квадратным сечением от направления теплового потока относительно кристаллографических осей. Максимальные значения теплопроводности наблюдаются для направлений потока тепла [100]. При низких температурах они превышают значения теплопроводности в направлениях [110] и [111] на 36 и 50%, соответственно. Результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности¹⁵ для всех направлений потока тепла согласуются с экспериментальными данными⁵ (см. рисунок 3). Анализ влияния фокусировки на распространение фононов в кристаллах Si показал¹⁵, что первый эффект МакКарди обусловлен фокусировкой медленной t_2 -моды, которая фокусируется в направлении [001] и обеспечивает максимум ПФС и, соответственно, теплопроводности в этом направлении. Следует отметить, что для всех образцов, имеющих

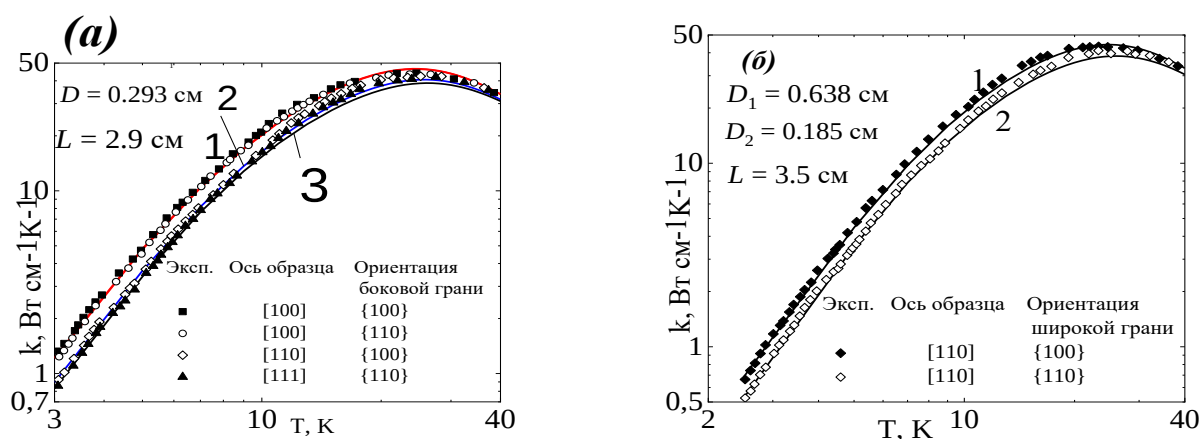


Рисунок 3 – Температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния (а) с квадратным сечением ($L=2.9$ см, $D=0.293$ см), (б) для образцов с прямоугольным сечением ($L=3.5$ см, $D_1=0.185$ см, $D_2=\mu D_1=0.638$ см, $\mu=3.45$) для симметричных направлений. Символы – экспериментальные данные⁵.

¹³ Callaway J. Phys. Rev. 1959. V 113. №. 4. P. 1046.

¹⁴ Кулеев И.Г., Кулеев И.И. ЖЭТФ. 2002. Т.122. З. С. 558 - 569.

¹⁵ Kuleyev I.I., Kuleyev I.G., Bakharev S.M., Inyushkin A.V. Phys. Stat. Sol. B. 2014. V. 251. № 5. P. 991-1000.

различные направления теплового потока относительно кристаллографических осей, учет изотопического и граничного рассеяния позволил согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными в интервале температур от 3 до 15 К без использования подгоночных параметров. Использование полученных формул для рассеяния фононов на границах образцов с прямоугольным сечением позволяет описать второй эффект МакКарди⁵ – зависимости теплопроводности для теплового потока в направлении $[011]$ от ориентации широких граней образцов Si. Из рисунка 3 видно, что температурные зависимости теплопроводности, рассчитанные для двух образцов с прямоугольным сечением, имеющих одинаковую площадь поперечного сечения и направление градиента температуры, но с различной ориентацией широких граней, хорошо согласуются с данными эксперимента⁵ (см. рисунок 3). При $T=3$ К для образца с широкой гранью $\{100\}$ и узкой $\{110\}$ теплопроводность оказалась на 31% больше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$ и узкой $\{100\}$. Эти результаты свидетельствуют, что аналитические решения для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов конечной длины $[A26]$ вполне адекватны реальной ситуации и должны использоваться при интерпретации особенностей фононного транспорта в других полупроводниковых и диэлектрических кристаллах.

Проанализированы и рассчитаны оба эффекта МакКарди в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии $[A8]$. Для этого были рассчитаны коэффициенты теплопроводности для монокристаллов с теми же геометрическими параметрами, что и в работе МакКарди. Результаты расчетов приведены в таблице 2. Исследованы особенности фокусировки фононов в образцах с квадратным и прямоугольным сечением и дана физическая интерпретация этих эффектов в теплопроводности диэлектрических кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии в условиях кнудсеновского течения фононного газа $[A8]$. 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 её фокусировка и максимум теплопроводности достигается в направлениях $[001]$, а минимум – в направлениях $[111]$. В тоже время в кристаллах второго типа фокусировка медленной t_2 -моды и максимум теплопроводности достигается в направлениях $[111]$, соответствующих минимуму теплопроводности в кристаллах первого типа, а минимум – в направлениях $[001]$.

Для анализа второго эффекта МакКарди необходимо рассмотреть особенности распространения каждой моды в образцах с прямоугольным сечением и учесть, во-первых, что длина свободного пробега фонона с волновым вектором $\mathbf{q}$ при диффузном рассеянии определяется расстоянием, пройденным фононом до столкновения с поверхностью образца. Во-вторых, что основной вклад в теплопроводность пластин вносят фононы, распространяющиеся почти параллельно плоскости пленок. Если при этом ось пластины совпадает с направлением фокусировки, то фононы будут отклоняться от широкой грани к оси образца и их длина свободного пробега возрастает, и соответственно увеличится их вклад в теплопроводность (см. рисунок 4). Если направление потока тепла будет совпадать с направлением дефокусировки, то фононы будут отклоняться от оси образца к широкой грани, и длина их свободного пробега уменьшается, и соответственно уменьшаются их вклады в теплопроводность.

Таблица 2 – Отношения теплопроводностей для кубических кристаллов в режиме кнудсеновского течения фононного газа при $T=3$ К: первый эффект МакКарди ($\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[110]}^{\{110\}} : \kappa_{[111]}^{\{110\}}$) – для образцов с квадратным сечением ($L=2.9$ см, $D=0.293$ см); второй эффект МакКарди ($\kappa_{[110]}^{\{100\}} : \kappa_{[110]}^{\{110\}}$) – для образцов с прямоугольным сечением ($L=5.5\mu D_1$, $D_1=0.185$ см, $D_2=\mu D_1=0.638$ см, $\mu=3.45$), ориентации широких граней $\{100\}$ и $\{110\}$ указаны в верхних индексах.

Б. Тип	Кристалл	$c_{11}, 10^{12}$ дин/см ²	$c_{12}, 10^{12}$ дин/см ²	$c_{44}, 10^{12}$ дин/см ²	$k-1$	Первый эффект $\mu=1$	Второй эффект $\mu=3.45$	Второй эффект $\mu=10$
I	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

Анализ влияния фокусировки на распространение и граничное рассеяние фононов в образцах с прямоугольным сечением показал, что этот эффект обусловлен изменением распределения теплового потока по поперечному сечению образца благодаря фокусировке быстрой поперечной моды в кристаллах обоих типов (см. рисунок 4). Он качественно отличается для кристаллов с различным типом упругой анизотропии. В кристаллах первого типа теплопроводность для образцов с широкой гранью $\{001\}$ будет больше, чем для образцов с широкой гранью $\{110\}$. В них фононы быстрой t_1 -моды с волновыми векторами в плоскости $\{110\}$ будут отклоняться от широкой грани $\{001\}$ к оси образца, то их длина свободного пробега возрастет. Однако в кристаллах второго типа – наоборот: теплопроводность для образцов с широкой гранью $\{011\}$ будет больше, чем для образцов с широкой гранью $\{001\}$. В этих кристаллах фононы быстрой t_1 -моды с волновыми векторами в плоскости $\{100\}$ будут отклоняться от широкой грани $\{011\}$ к оси образца, поэтому их средняя длина свободного пробега возрастет.

В главе 3 рассмотрены особенности фононного транспорта в полупроводниковых и диэлектрических наноструктурах с различным типом упругой анизотропии, а

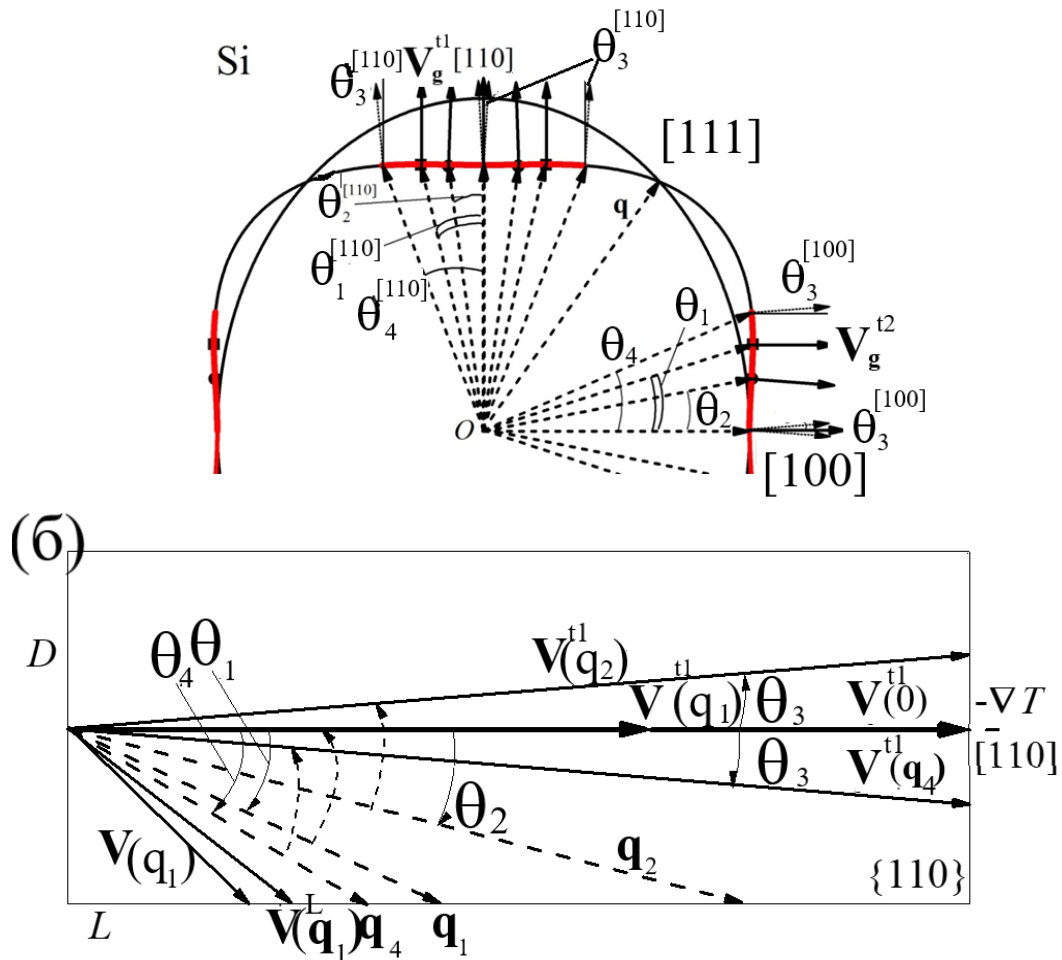


Рисунок 4 – Схемы, иллюстрирующие влияние фокусировки на распространение фононов медленной и быстрой t -мод в образцах Si с прямоугольным сечением в плоскости $\{110\}$ и градиента температуры вдоль $[110]$. Рассмотрены фононы с волновыми векторами, направленными под углом $\theta_1^{t1} = 13.4^\circ$, $\theta_2^{t1} = 7.5^\circ$, $\theta_3^{t1} = 0.86^\circ$ и $\theta_4^{t1} = 15.7^\circ$.

также в материалах, 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, 2) наногетероструктуры Fe/MgO/Fe с туннельным барьером MgO, демонстрирующие эффект гигантского туннельного магнитосопротивления, 3) гибридные гетероструктуры Fe/GaAs и Fe/InSb, в которых реализована спиновая инжекция электронов проводимости из металлического ферромагнетика в полупроводник. Определены средние значения плотности фононных состояний 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 длины свободного пробега фононов для всех акустических мод. Показано, что для всех нанопроводов угловые зависимости длины пробега быстрых и медленных поперечных мод в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ коррелируют с угловыми зависимостями ПФС этих мод (см. рисунок 5). Максимальные значения длин пробега реализуются в областях фокусировки, которые соответствуют максимумам ПФС для этих

мод. Максимумы теплопроводности в спинтронных материалах обеспечиваются медленной квазипоперечной модой и достигаются в направлениях типа $[100]$. Нами показано, что нет однозначной корреляции между параметрами упругой анизотропии $k-1$ и анизотропией решеточной теплопроводности. В исследованных кристаллах максимум параметра $k-1$ достигается для Fe, а минимум - для MgO, однако максимальная анизотропия теплопроводности из рассмотренных наноструктур имеет место для кристаллов MgO. Определены направления потоков тепла, обеспечивающие максимальную и минимальную фононную теплопроводность в нанопроводах.

Рассмотрено влияние фокусировки фононов на анизотропию длин пробега фононов в квадратных пленках ($L=W$) с различными ориентациями плоскостей. Было показано, что теплопроводность и 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 $[100]$. При этом теплопроводность пленок Fe и MgO с ориентацией $\{100\}$ более, чем в два раза превосходит значения для ориентации $\{111\}$. В квадратных пленках с ориентацией $\{100\}$ и $\{111\}$ для произвольного направления потока тепла область усреднения длины пробега по углам в плоскости пленок захватывает одновременно направления фокусировки и дефокусировки фононов. Поэтому теплопроводность (средняя длина свободного пробега), а также длина 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

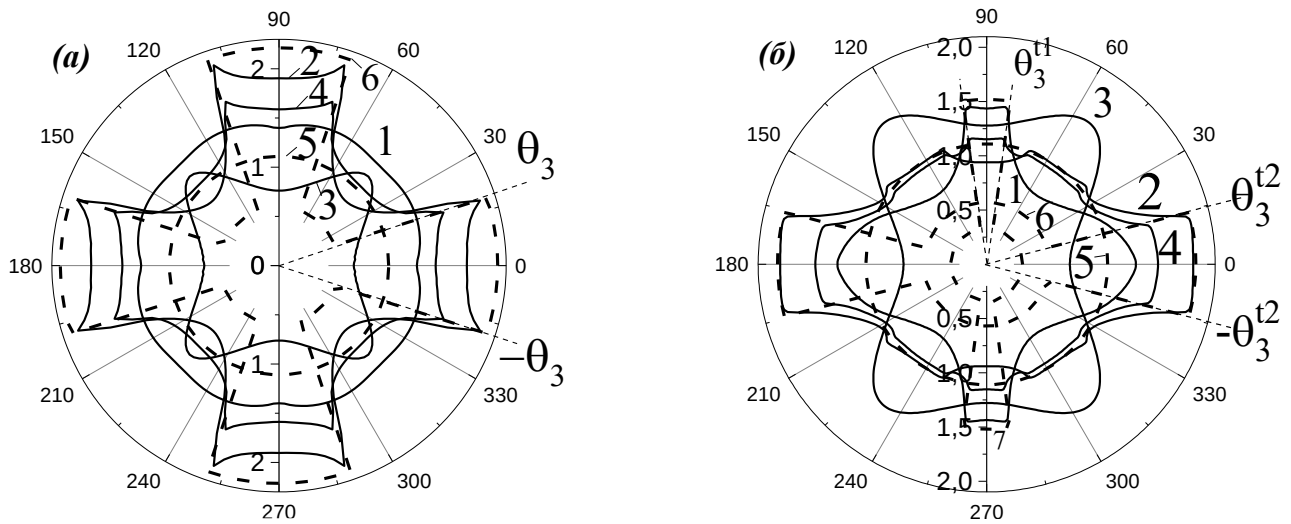


Рисунок 5 – Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} / D$ и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} / D$ в Fe для образцов с квадратным сечением $D = 50$ нм и длиной $L = 100D$ в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Кривая 1 – для быстрой поперечной моды, 2 – для медленной поперечной моды, 3 – для продольной моды, 4 – средняя длин свободного пробега. Пунктирная кривая 5 - для изотропной среды ($\Lambda_{iso} = 1.11D$). Штриховые линии 6 иллюстрируют угловое распределение плотности состояний для медленной поперечной моды в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$.

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. С увеличением длины пленок интервалы углов, дающих основной вклад при усреднении длины свободного пробега в плоскости пленок, значительно сужаются. В предельном случае $L \gg W$ 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. Анализ влияния фокусировки на распространение фононных мод в пленках с ориентацией $\{100\}$ и $\{111\}$ показал, что для квадратных пленок с плоскостью $\{100\}$ для быстрых и медленных поперечных фононов преобладает эффект фокусировки. Тогда как в пленках с плоскостью $\{111\}$ для медленной t_2 -моды преобладает эффект дефокусировки, и её длина свободного пробега 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 $\{111\}$.

В работе¹⁶ были измерены зависимости теплопроводности гетероструктур GaAs/AlGaAs от температуры в интервале от 0.2 до 1 К. Подложки GaAs имели прямоугольную форму с геометрическими размерами: для первого образца $9.5 \times 4 \times 0.4$ мм, ориентация плоскости гетероструктуры $\{100\}$ и направление потока тепла $[100]$, а для второго образца $9.5 \times 4.5 \times 0.4$ мм, ориентация плоскости гетероструктуры $\{110\}$ и направление теплового потока $[110]$. Анализ теплопроводности в трехмодовой модели Каллавея показал, что в интервале от 0.2 до 1 К ангармонические процессы рассеяния выморожены, вклад рассеяния на изотопическом беспорядке мал, и составляет менее 0.2 %. Согласно¹⁶ в интервале (0.2 - 0.8) К теплопроводность следовала зависимости T^3 , что соответствует преобладающей роли граничного рассеяния фононов. При более высоких температурах степень температурной зависимости уменьшается, и экспериментальные зависимости для гетероструктур с различными ориентациями начинают сближаться. Таким образом, в интервале от 0.2 до 0.8 К в гетероструктурах GaAs реализуется случай кнудсеновского течения фононного газа. Оценки показывают, что в этом режиме теплопроводность для ориентации плоскости $\{100\}$ оказывается в 1.9 раза больше, чем для ориентации $\{110\}$. В этом режиме 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, для нано и гетероструктур такая процедура невозможна. Поэтому мы учли частичную зеркальность рассеяния фононов обычным образом:

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

и определили параметры зеркальности отражения фононов от границ гетероструктур. Как видно из рисунка 6, при учете факторов зеркальности $P_1 = 0.37$ для первой гетероструктуры и $P_2 = 0.29$ - для второй результаты расчета теплопроводности в низкотемпературной области хорошо согласуются с экспериментальными данными¹⁶. Рассчитаны угловые зависимости длин свободного пробега квазипродольных и квазипоперечных фононов, а также средние значения длин пробега, определяющих теплопро-

¹⁶ B. Tieke, R. Fletcher, U. Zeitler, M. Henini, J. C. Maan. Phys. Rev. B **58**, 2017 (1998).

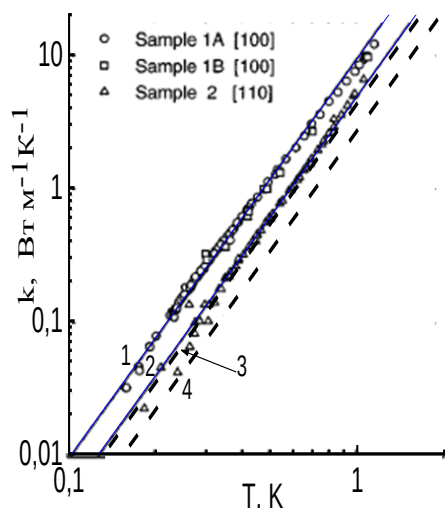


Рисунок 6 – Температурные зависимости теплопроводности гетероструктур GaAs с ориентациями плоскостей $\{100\}$ и $\{110\}$: кривая 1 - $\kappa^{[100]}=9.4T^3$, кривая 2- $\kappa^{[110]}=4.9T^3$, кривые 3 и 4 - рассчитанные при полностью диффузном рассеянии для направления $[100]$ и $[110]$. Символы – экспериментальные значения теплопроводности¹⁶.

водность гетероструктур с ориентациями плоскостей $\{100\}$ и $\{110\}$. Показано, что для ориентации плоскости $\{100\}$ теплопроводность имеет малую анизотропию и значительно большие значения, чем для ориентации $\{110\}$. Изучена роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в теплопроводности гетероструктур. Показано, что доминирующий вклад в теплопроводность вносят квазипоперечные фононы, которые обеспечивают от 80 до 93% теплоперенос. Анизотропия теплопроводности гетероструктур в режиме кнудсеновского течения фононного газа обусловлена медленной t_2 -модой, которая фокусируется в направлении $[100]$ и обеспечивает максимальные значения теплопроводности.

В четвертой главе исследовано влияние анизотропии упругой энергии на термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов калия. Ранее при исследовании электрон-фононной релаксации электронного транспорта в металлах^{9,12} предполагалось, что для фононов можно использовать модель изотропной среды. В этой модели только продольные фононы могут взаимодействовать с электронами через потенциал деформации, и давать вклад в электросопротивление и термоэдс увлечения^{9,12}. В работах^{17,18} 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, интерпретировались в модели изотропной среды. Влияние упругой анизотропии кристалла на спектр, векторы поляризации фононов и электрон-фононную релаксацию не учитывались.

Следует отметить, что полупроводниковые кристаллы (такие, как германий, кремний) являются не очень удобным объектом для исследования влияния упругой анизотропии на термоэдс увлечения, так как в них велика анизотропия электронного спектра. Выделение вклада упругой анизотропии представляет определенные трудности, а примесное легирование и связанное с ним релеевское рассеяние фононов на дефектах затрудняет достижения режима кнудсеновского течения фононного газа,

¹⁷ Stinson M. R. and Fletcher R., Leavens C. R. Thermomagnetic and thermoelectric properties of potassium // Phys. Rev. B 1979. V.20. P.3970-3990.

¹⁸ Fletcher R. Scattering of phonons by dislocations in potassium// Phys. Rev. B. 1987. V.36. P.3042-3051.

который необходим для наблюдения анизотропии термоэдс увлечения. 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. Они имеют аномально большой по сравнению с полупроводниковыми кристаллами параметр анизотропии упругой энергии. Поэтому отклонение направлений групповых скоростей от волновых векторов фононов в кристаллах калия, приводящее к их фокусировке, должно значительно сильнее сказываться на фононном транспорте, чем в полупроводниковых кристаллах. 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 нами уделено исследованию влияния фокусировки фононов на электронный и фононный транспорт в кристаллах калия при низких температурах. В работах [A9-A13] определен спектр, векторы поляризации фононов, а также проанализированы термоэдс увлечения и решеточная теплопроводность для кристаллов калия. В них предполагается, что квазипоперечные фононы в кристаллах калия могут взаимодействовать с электронами только благодаря их продольной компоненте, в рамках стандартной теории потенциала деформации^{9,12}. При этом константа деформационного потенциала $E_{0\lambda}$ одинакова для продольных компонент всех колебательных мод: в кристаллах калия $E_{0\lambda} = (2/3)\varepsilon_F = 1.41$ эВ. Однако в этих предположениях нам не удалось согласовать результаты расчета термоэдс кристаллов калия с экспериментальными данными. Расчет термоэдс увлечения в работе [A13] в интервале $T=(1-3)$ К давал значения, почти в два раза меньшие данных¹⁸. Поэтому в работе [A14] мы учли влияние сдвиговых волн на электрон-фононную релаксацию и впервые проанализировали их роль в термоэдс увлечения в металлах при низких температурах. Из сопоставления результатов расчета термоэдс и решеточной теплопроводности в объёмных кристаллах калия с экспериментальными данными¹⁸ определена константа электрон-фононного взаимодействия для сдвиговых компонент колебательных мод $E_{0t} = 0.11$ эВ. Полученное значение E_{0t} оказалось на порядок величины меньше, чем следует из теории деформационного потенциала для продольных компонент. Взаимодействие электронов с поперечными компонентами колебательных мод описывается вихревым полем [A14], а с продольными колебаниями – потенциальным полем. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют. Вследствие этого они входят в матричный элемент электрон-фононного взаимодействия аддитивным образом, который, согласно [A14], может быть представлен в виде:

$$(C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 \approx (E_{eff}^\lambda)^2 \hbar / (S^\lambda(\theta, \varphi) \rho), \quad (E_{eff}^\lambda)^2 = (E_{0L}^2 (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n})^2 + E_{0t}^2 [\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}]^2), \quad E_{0L} = (n / N(\varepsilon_F)) = (2/3)\varepsilon_F. \quad (4)$$

При анализе термоэдс увлечения в проводниках с вырожденной статистикой носителей тока для фононов использована модель изотропной среды^{6,7,8,9}. Использование модели анизотропного континуума для фононов в работе [A2] позволило учесть влияние анизотропии упругой энергии кристалла на фокусировку и векторы поляризации фононов при расчете термоэдс увлечения в вырожденных полупроводниках. Эта модель использована в работах^{17,18} при анализе термоэдс увлечения в кристаллах калия. Для расчёта термоэдс увлечения и электросопротивления в металлах используем систему кинетических уравнений для неравновесных электронной f_k и фонон-

ной N_q^λ функций распределения⁷

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_r) f_{\mathbf{k}} = I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_q^\lambda), \quad (5a)$$

$$\mathbf{v}_q^\lambda \nabla_r N_q^\lambda = -(N_q^\lambda - N_{q\lambda}^{(0)}) v_{ph}^{(1)\lambda} + I_{phe}(N_q^\lambda, f_{\mathbf{k}}), \quad (5b)$$

где $I_{ei}(f_{\mathbf{k}})$ и $I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_q^\lambda)$ - интегралы столкновения электронов с примесями и фононами, $\mathbf{E}_0$ - напряженность электрического поля, $v_{ph}^{(1)\lambda}(q, \theta, \varphi)$ включает все неэлектронные резистивные механизмы релаксации фононов на границах образца, дислокациях, и изотопическом беспорядке, а $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \partial \varepsilon_{\mathbf{k}} / \partial \hbar \mathbf{k}$, $\mathbf{v}_q^\lambda = \partial \omega_q^\lambda / \partial \mathbf{q}$ - групповые скорости электронов и фононов с поляризацией λ . Спектр электронов проводимости считается изотропным, а для фононов используем модель анизотропного континуума. Схема, описывающая релаксацию импульса квазичастиц в неравновесной электрон-фононной системе приведена на рисунке 7 (а). Релаксация импульса электронов обеспечивается рассеянием на примесях и дефектах, а фононов – на изотопическом беспорядке, дефектах и границах образца. Механизмы электрон-фононной релаксации, характеризуемые частотами ν_{eph} и ν_{phe} , 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 $\mathbf{k}$ и спином σ , а фононов – в состоянии с волновым вектором $\mathbf{q}$ и поляризацией $\mathbf{e}^\lambda$. Поскольку термоэдс находится из условия равенства нулю полного тока через образец^{9,12}, 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 [A4] (см. рисунок 7б). В противоположность этому при наличии градиента температуры существует стационарный поток фононов от горячего конца образца к холодному, поэтому передача импульса электронам от стационарного потока фононов велика. Она определяет ток увлечения j_{drag} и в значительной степени

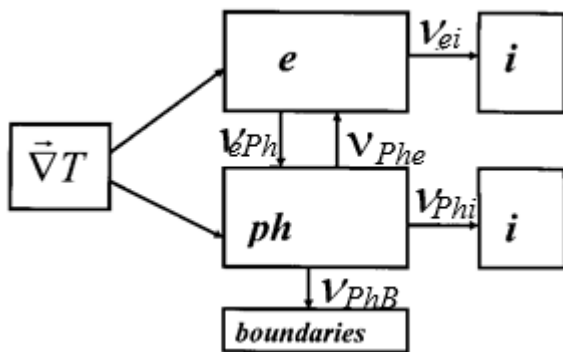


Рисунок 7 (а) – Схема, иллюстрирующая перераспределение и релаксацию импульса, полученного электрон-фононной системой от градиента температуры.

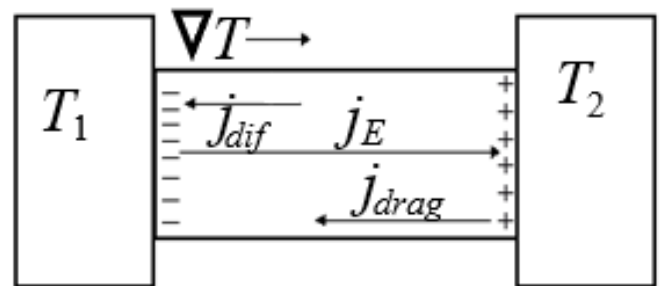


Рисунок 7 (б) – Схема, иллюстрирующая возникновение термоэдс в металлах: j_{dif} – диффузионный ток, j_{drag} – ток электрон-фононного увлечения, j_E – ток, обусловленный термоэлектрическим полем.

полную термоэдс при низких температурах (см. рисунок 7 б). Непосредственное действие градиента температуры на подсистему электронов приводит к диффузии электронов от горячего конца образца к холодному и, соответственно, к диффузионному вкладу в термоэдс. Этот вклад в термоэдс пропорционален параметру вырождения и при температурах выше 1 К мал по сравнению с термоэдс увлечения, которая может быть представлена в виде:

$$\alpha_{drag}(T) \approx BT^3, \quad B = \frac{k_B(m_F)^2 J_{3ne}}{en_{e0}\pi^3\hbar^4} \sum_{\lambda} \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_q \left(\frac{k_B}{\hbar S^{\lambda}(\theta, \varphi)} \right)^3 \left(\frac{(C_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^2 \times \{\tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3}\}}{[\nu_{pd}^{*\lambda}(\theta, \varphi) + \nu_{pe}^{*\lambda}(\theta, \varphi)]} \right), \quad (6)$$

$$J_{3ne} = \int_0^{\infty} \Phi(Z_q^{\lambda}) dZ_q^{\lambda} = 24.1, \quad \Phi(Z_q^{\lambda}) = (Z_q^{\lambda})^3 th(Z_q^{\lambda}/2) / \{4 \cdot (sh(Z_q^{\lambda}/2))^2\},$$

где $\nu_{phd}^{*\lambda}(\theta, \varphi) \approx 2.03 \cdot 10^{-4} \tilde{N}_d$ и $\nu_{phe}^{*\lambda}(\theta, \varphi) = m_F^2 (C_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^2 / (2\pi \cdot \hbar^4)$ – безразмерные скорости релаксации фононов на дислокациях и электронах, а $\tilde{N}_d$ – подгоночный параметром для образцов с различной степенью деформации, m_F и n_e – эффективная масса и концентрация электронов. Низкотемпературная зависимость термоэдс увлечения типа $\alpha_{drag} \approx BT^3$ для кристаллов калия согласуется с зависимостями для большого количества металлов^{7,17,19}. Естественно, что уменьшение концентрации дислокаций приводит к увеличению коэффициента $|B|$. Его максимальное значение достигается при $\tilde{N}_d = 0$. Этот случай представляет особый интерес, поскольку он позволяет сделать оценку максимальных значений термоэдс увлечения, в совершенных кристаллах калия без дислокаций. В этом случае коэффициент $|B_{max}|$ определяется упругими модулями второго порядка, плотностью кристалла и концентрацией электронов:

$$B_{max} = \frac{15J_{3ne}}{en_{e0}(\pi)^4} \left[\frac{2(\pi)^2(k_B)^4}{15\hbar^3} \sum_{\lambda} \left\langle \left(\frac{\{\tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3}\}}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3} \right) \right\rangle \right] \approx 8.33 \text{ нВ/К}^4. \quad (7)$$

Отношение вкладов колебательных мод в термоэдс увлечения имеет вид:

$$\alpha_{drag}^{t2} : \alpha_{drag}^{t1} : \alpha_{drag}^L : \alpha_{drag} = 0.78 : 0.184 : 0.0366 : 1. \quad (8)$$

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

$$C_V = \frac{2\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3} T^3 \left\{ \sum_{\lambda} \left\langle (S^{\lambda})^{-3} \right\rangle \right\}. \quad (9)$$

Как видно из (9), вклады от различных мод обратно пропорциональны отношениям средних значений фазовых скоростей фононов различных поляризаций в третьей степени. Поэтому термоэдс увлечения для совершенных кристаллов пропорциональна теплоемкости и обратно пропорциональна концентрации электронов:

$$\alpha_{drag}(T) \approx B_{max} T^3 = \frac{C_V}{en_{e0}} R_{drag}, \quad R_{drag} = \frac{15J_{3ne}}{(\pi)^4} \sum_{\lambda} \left\langle \left(\frac{\{\tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3}\}}{(S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3} \right) \right\rangle / \left\{ \sum_{\lambda} \left\langle (S^{\lambda})^{-3} \right\rangle \right\} \approx 0.31. \quad (10)$$

¹⁹ Гуревич Л.Э. Термоэлектрические свойства проводников. //ЖЭТФ. 1946. Т.16. С. 193-227.

При сравнении вкладов различных колебательных мод в электрон-фононную релаксацию и кинетические коэффициенты мы должны учитывать, что большие значения импульса фононов при фиксированной энергии приводят к увеличению вкладов этой моды в термоэдс увлечения и электросопротивление кристаллов. Поэтому медленная t_2 -мода, имеющая минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированном значении энергии фонона, вносит максимальный вклад в термоэдс увлечения. Для кристаллов калия он в 21 раз превышает вклад продольных фононов.

Рассмотрим баланс импульса в системе электронов, взаимодействующих с фононами в изотермических условиях и определим электросопротивление кристаллов калия [A15]. Учет влияния анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление кристаллов калия. Будем предполагать, как и в теории Блоха-Грюнайзена^{7,8,9}, что подсистема фононов остается в равновесии, а для подсистемы электронов реализуется дрейфовое локально равновесное состояние, которое можно описать в гидродинамическом приближении^{8,20,21}:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{u}_e) = f_0(\varepsilon_k) + \delta f_k, \quad \delta f_k = (\hbar \mathbf{k} \mathbf{u}_e) (\partial f_0 / \partial \varepsilon_k), \quad (11)$$

где $f_0(\varepsilon_k)$ - функция Ферми, дрейфовая скорость электронов $\mathbf{u}_e$ определяется из уравнения баланса импульса электронов, которое получается из кинетического уравнения путем умножения на импульс $\hbar \mathbf{k}$ и суммированием по всем импульсам электронов. Рассеяние на примесях обеспечивает выход температурных зависимостей электросопротивления на постоянное значение. Мы не будем рассматривать этот эффект, а сосредоточимся на анализе фононной части электросопротивления $\rho_{e-ph}(T)$ (см. [A15]). Его мы представим в виде произведения угловой части B_Ω^λ на интеграл B_Z^λ от функции распределения наиболее эффективных фононов $\Phi(Z_q^\lambda)$:

$$\rho_{e-ph}(T) = \left(\frac{m_F}{e^2} \right) v_{eph}(k_F, T) = \sum_\lambda B_\Omega^\lambda(T) B_Z^\lambda, \quad B_\Omega^\lambda(T) = \frac{(m_F)^2 (k_B T)^5}{6\pi^3 \hbar^7 e^2 \rho n_e} \int d\Omega_q \frac{(E_{eff}^\lambda(\theta, \varphi))^2}{\{S^\lambda(\theta, \varphi)\}^6},$$

$$B_Z^\lambda = \int_0^{Z_{D\lambda}} dZ_q^\lambda \Phi(Z_q^\lambda), \quad \Phi(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^4 N_{q\lambda}^0 \int \frac{d\varepsilon_k}{k_B T} \cdot f_0(\varepsilon_k) [1 - f_0(\varepsilon_k + \hbar \omega_q^\lambda)], \quad Z_q^\lambda = \frac{\hbar \omega_q^\lambda}{k_B T}. \quad (12)$$

При низких температурах $T \ll \theta_D$ (для калия температура Дебая $\theta_D = 90.6$ К) 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: $B_1^{t_2} : B_1^L : B_1^{t_1} = 0.9 : 0.08 : 0.02$. Как видно из формулы (10), доминирующая роль t_2 -моды в электросопротивлении калия обусловлена анизотропией упругой энергии. Отношение коэффициентов $B_\Omega^\lambda(T)$ для медленной t_2 -моды и L -фононов имеет вид:

²⁰ Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.

²¹ Chi T. C. Electrical resistivity of alkali elements // J. of Phys. and Chem. Ref. Data. 1979. V.8. P.339-438.

$$B_{\Omega}^{t_2} / B_{\Omega}^L = \left\langle \left(E_{\text{eff}}^{t_2}(\theta, \varphi) \right)^2 / \left\{ S^{t_2}(\theta, \varphi) \right\}^6 \right\rangle / \left\langle \left(E_{\text{eff}}^L(\theta, \varphi) \right)^2 / \left\{ S^L(\theta, \varphi) \right\}^6 \right\rangle. \quad (13)$$

Квадрат эффективной константы связи для продольных фононов с электронами $\langle (E_{\text{eff}}^L)^2 \rangle$ 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 $\langle S^L \rangle / \langle S^{t_2} \rangle = 2.54$. Шестая степень этого отношения дает величину на два порядка большую. В результате вычисления угловых средних в (13) при низких температурах имеем: $B_{\Omega}^{t_2} / B_{\Omega}^L \approx 11.5$. Итак, медленная t_2 -мода вносит доминирующий вклад в релаксацию электронного импульса. **Поэтому вклад квазипоперечных мод в электросопротивление калия, который ранее не учитывался, составляет 92%, тогда как на продольные фононы приходится всего 8%.** Это первый результат учета влияния упругой анизотропии на электросопротивление щелочных металлов.

Гидродинамическое приближение позволяет нам ввести функцию распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов и избежать некорректной процедуры разложения функций Ферми $f_0(\varepsilon_k \pm \hbar\omega_q^{\lambda})$ по параметру неупругости $Z_q^{\lambda} = \hbar\omega_q^{\lambda} / (k_B T)$. По проблеме учета неупругости в электрон-фононном рассеянии в научной литературе нет корректного понимания^{12,20}. В монографии²⁰ утверждается, что неупругостью электрон-фононного рассеяния в металлах при низких температурах можно пренебречь, поскольку энергия Ферми гораздо больше энергии фонона $\hbar\omega_q^{\lambda}$ и $k_B T$. В монографии Займана¹⁰ утверждалось, что энергия падающего и рассеянного фонона лежат в пределах теплового размытия энергии Ферми, поэтому они отличаются на величину порядка $k_B T$, 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 интегралы электрон-фононных столкновений входит функция Ферми $f_0(\varepsilon_k \pm \hbar\omega_q^{\lambda})$, а её аргументом является функция $y_k \pm \hbar\omega_q^{\lambda} / (k_B T)$, где $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T)$. Естественно, что параметром неупругости, ответственным за поглощение или испускание фонона, является величина $Z_q^{\lambda} = \hbar\omega_q^{\lambda} / k_B T$, которую нужно сравнивать с величиной $y_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_F) / (k_B T)$, а не с энергией Ферми. 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. Функция распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов $\Phi(Z_q^{\lambda})$, учитывающая неупругость рассеяния электронов определяется выражением (12). Из рисунка 8 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 3 $J_5(Z_q^{\lambda})$, полученной для электросопротивления при решении задачи вариационным методом^{9,12}. В упругом приближении

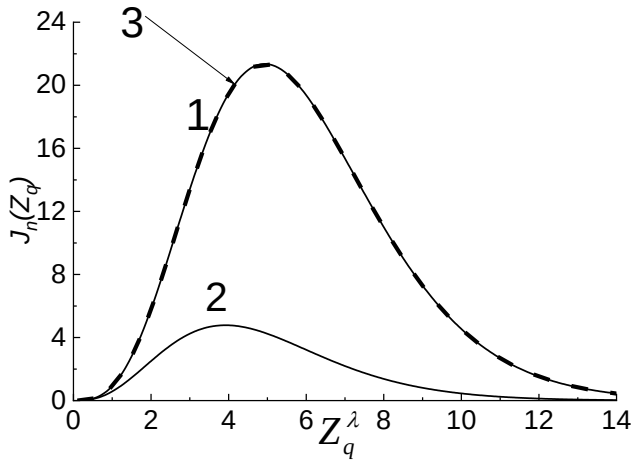


Рисунок 8 – Функции распределения наиболее эффективных для электросопротивления фононов от параметра Z_q^λ : кривая 1 - $\Phi(Z_q^\lambda)$ (для неупругого рассеяния электронов), кривая 2 - $J_{4el}(Z_q^\lambda)$ (для упругого рассеяния электронов), штриховая кривая 3 определяется выражением $J_5(Z_q^\lambda) = (Z_q^\lambda)^5 N_q^\lambda (N_q^\lambda + 1)$, полученным при расчете электросопротивления вариационным методом⁹.

мы получаем кривую 2. Таким образом, наиболее актуальные для электросопротивления фононы распределены в интервале $1 < Z_q^\lambda < 12$ с максимумом при $Z_q^\lambda \approx 5$. Для них неравенство $Z_q^\lambda \ll 1$ не выполняется. Более того, для актуальных фононов в области теплового размытия уровня Ферми $|y_k| \leq 1$ выполняется противоположное неравенство: $|y_k| = |(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/(k_B T)| \ll Z_q^\lambda$. Поэтому основной вклад в электросопротивление при низких температурах вносят не «вертикальные» переходы с энергиями фононов $\hbar\omega_q^\lambda \approx (k_B T)$ или «горизонтальные» переходы по терминологии Займана¹⁰, для которых волновой вектор $q \sim k_F$, а «косые» переходы, для которых $k_B T \leq \hbar\omega_q^\lambda \leq 12k_B T$. Не трудно убедиться, что в приближениях упругого и неупругого рассеяния имеем: $B_{zel}^\lambda \approx 24.9$ и $B_{znel}^\lambda \approx 124$. Таким образом, учет неупругости электрон-фононного рассеяния увеличивает электросопротивление металлов в 5 раз.

Наиболее интересным результатом этой главы является анализ вкладов квазипоперечных фононов в электросопротивление кристаллов калия. Нами показано, что в кристаллах калия при низких температурах $T \ll \theta_D$ (в нашем случае $T < 10$ К), где согласно теории Блоха-Грюнрайзена^{7,8} электросопротивление следует зависимости T^5 , вклад квазипоперечных фононов в электросопротивление, который ранее не учитывали, оказался на порядок величины больше, чем вклад продольных фононов (см. рисунок 9). В этой области температур вклад поперечной компоненты медленной t_2 -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 t_2 -моды, и при температурах выше 25 К он уже преобладает (см. рисунок 9). С дальнейшим повышением температуры вклад продольных фононов начинает доминировать и при комнатной температуре 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. t_2 -мода имеет минимальную фазовую скорость и, соответственно, максимальный волновой вектор при фиксированной энергии фонона. Поэтому она вносит максимальный вклад в электросопротивление. Соотношение вкладов имеет вид: $\rho_{e-ph}^{t_2} : \rho_{e-ph}^L : \rho_{e-ph}^{t_1} = 0.9 : 0.08 : 0.02$. При этом релаксация на продольной компоненте медленной

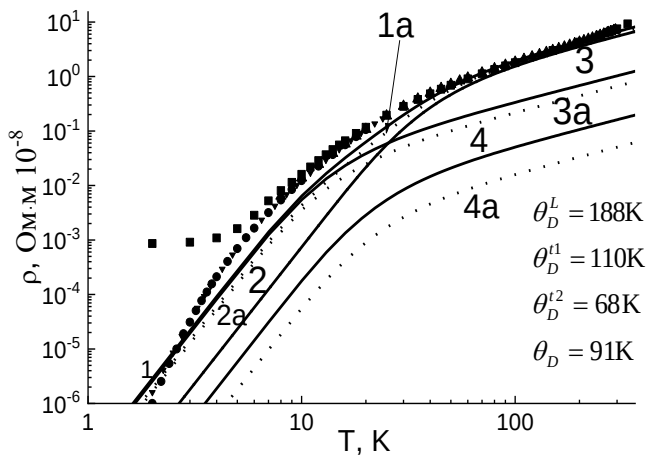


Рисунок 9 – Температурные зависимости электросопротивления кристаллов калия - кривые 1, 1а, а также вкладов в него от продольных фононов - кривые 2, 2а, медленных - кривые 3, 3а и быстрых квазипоперечных фононов - кривые 4, 4а. Символы экспериментальные данные работ^{21,22}. Сплошные кривые 1, 2, 3, 4 расчет при учете продольной и сдвиговой компоненты взаимодействия (6). Штриховые кривые 1а, 2а, 3а, 4а расчет при учете только продольной компоненты для всех колебательных мод.

t_2 -моды обеспечивает 58% электросопротивления, тогда как сдвиговая компонента дает 32%. Из сравнения результатов расчета с данными эксперимента^{21,22} видно, что при температурах выше 40 К они хорошо согласуются (см. рисунок 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 $\gamma \sim (2-3)$. 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 данными^{21,22} при температурах $T > 30$ К без использования подгоночных параметров. При более низких температурах $T < 30$ К, процессы фонон-фононного переброса вымораживаются, но возрастает роль процессов электрон-фононного переброса, которые нами не учитываются. Поэтому рассчитанные нами величины электросопротивления кристаллов калия оказались заметно меньше экспериментальных данных²² в интервале $5 \text{ К} < T < 20 \text{ К}$. Температура активации процессов электрон-фононного переброса составляет 20 К, а максимальную роль они играют при $T \approx 10$ К (см. рисунок 9). Согласно данным по термоэдс¹⁷, а также анализу [A14, A15], процессы электрон-фононного переброса вымораживаются при $T < 5$ 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^{18,19}. Естественно, что вымораживание процессов электрон-фононного переброса, а также эффект взаимного увлечения электронов и фононов приводит к более быстрому уменьшению электросопротивления кристаллов калия, чем дает теория Блоха-Грюнайзена. В результате в температурном интервале от 1.5 К до 2.5 К данные эксперимента близки к рассчитанным значениям электросопротивления калия (см. рисунок 9). Это указывает на доминирующую роль нормальных процессов электрон-фононного рассеяния в термоэдс увлечения электросопротивлении. Это позволило в конечном счете успешно определить константу вза-

²² Guban D. The electrical resistivity of potassium below 4.2 K //Proc. R. Soc. Lond. A. 1971. V.325. P.223-249

имодействия электронов с поперечными компонентами колебательных мод. Проведенный нами анализ взаимного увлечения электронов и фононов в кристаллах калия показал:

(1). В предельном случае сильного взаимного увлечения электронов и фононов, когда для электронов 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 скорости дрейфа фононов всех поляризаций равны и близки к скорости дрейфа электронов; 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.

В пятой главе исследовано влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах калия при низких температурах. Интерес к этим исследованиям связан с тем, 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 [A11-A13]. Для проявления этого эффекта необходимо, чтобы рассеяние фононов на границах образцов преобладало над объёмными механизмами рассеяния, главным из которых является электрон-фононная релаксация. Очевидно, что для реализации этого условия необходимо обеспечить достаточно низкие температуры и иметь наноструктуры достаточно малых размеров. В работах [A16-A18] 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 монокристаллах калия при низких температурах. Следует отметить, что влияние фокусировки на распространение фононных мод и анизотропию термоэдс увлечения в монокристаллических наноструктурах на основе калия анализируется в рамках феноменологического метода Казимира–МакКарди^{1,5,23}. Этот метод предполагает использование трехмерного спектра фононов, поэтому возникают естественные ограничения на минимальные размеры наноструктур: диаметр нанопроводов и толщина пленок, при которых влиянием пространственного конфайнмента на спектр акустических мод можно пренебречь. Анализ, проведенный в работах^{24,25}, показал, что для нанопроводов диаметром больше 50 нм и пленок

²³ Maris H. J. Enhancement of heat pulses in crystals due to elastic anisotropy // J. Acoust. Soc. Am. 1971. V. 50. P.812.

²⁴ Li D., Wu Y., Kim P., Shi L., Yang P., Majumdar A. Thermal conductivity of individual silicon nanowires // Applied Physics Letters. 2003. V. 83. P. 2934-2936.

²⁵ Liu W. and Asheghi M. Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers // Applied Physics Letters. 2004. V. 84. P. 3819-3821.

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 температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок и нанопроводов в [A26, A27] подтвердили этот вывод.

При исследовании влияния фокусировки фононов на анизотропию электронного и фононного транспорта в наноструктурах калия мы зафиксировали температуру 2 К, рассчитали решеточную теплопроводность и угловые зависимости длин свободного пробега фононов. Оказалось, что в режиме кнудсеновского течения фононного газа, когда доминирует граничное рассеяние фононов, угловые зависимости термоэдс увлечения и длин свободного пробега фононов для всех поляризаций коррелируют. Этот результат не является удивительным, так как, чем больше длина свободного пробега фонона относительно его рассеяния на границах образца, тем больше вероятность электрона столкнуться с неравновесным фофоном и получить дополнительный импульс от градиента температуры.

Анализ, проведенный в работах [A16-A18] 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 наноструктур с поперечными размерами $D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см диффузное рассеяние фононов на границах становится доминирующим механизмом релаксации, и 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 $\kappa(T) \approx C T^3$ [A16-A18]. При увеличении поперечных размеров роль объёмных механизмов релаксации возрастает, а анизотропия термоэдс увлечения наноструктур уменьшается [A16-A18]. При $D > 10^{-2}$ 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: $\alpha_{drag}(T) \approx A T^3$ и $\kappa(T) \approx B T^2$ (см. [A23]). Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в наноструктурах. В условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов рассеяния фононов термоэдс увлечения в наноструктурах, вместо формулы (6), будет определяться выражением:

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{3}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \int_0^{\infty} dZ_q^{\lambda} (Z_q^{\lambda})^4 th(Z_q^{\lambda}/2) \left(\frac{v_{eph0}^{\lambda}(k_F, q_T^{\lambda})}{v_{ph}^{\lambda}(q)} \right) \left(\frac{2m_F (S^{\lambda}(\theta, \varphi))^2}{k_B T} \right) \{ \tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3} \} \quad (14)$$

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

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 $v_{ph}^{\lambda}(q, \theta, \varphi) \approx v_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi)$ термоэдс увлечения имеет вид:

$$\alpha_{drag} \approx B_2 T^4, \quad B_2 = 24.1 \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{(m_F)^2 (k_B)^4}{n_e^3 \hbar^8} \right) \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \left(\frac{(C_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^2 \tilde{V}_{g3}^{\lambda} n_{q3}}{v_{phB}^{\lambda}(q) (S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3} \right). \quad (15)$$

Из выражений для скоростей релаксации фононов на границах нанопроводов [A16] следует, что с уменьшением поперечного размера D их величины возрастают. В выражении для теплопроводности $\kappa(T)$ выделим теплоемкость единицы объема C_V , среднюю скорость фононов $\bar{S}$ и среднюю длину свободного пробега фононов Λ_{ph} :

$$\kappa(T) = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \Lambda_{ph}, \quad C_V = \frac{2\pi^2 k_B^4}{5\hbar^3} T^3 \frac{1}{3} \sum_{\lambda} \langle (S^{\lambda})^{-3} \rangle, \quad \Lambda^{\lambda} = \frac{3}{4\pi \langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{(V_{g3}^{\lambda}(\theta, \varphi))^2}{v_{phB}^{\lambda}(\theta, \varphi) (S^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}. \quad (16)$$

Отметим, 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. Результаты расчетов показали, что в направлениях фокусировки длины пробега в упруго анизотропных наноструктурах значительно превышают Λ_{iso} , тогда как в направлениях дефокусировки она меньше Λ_{iso} . Как видно из рисунка 10, для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ длина пробега продольных фононов $\Lambda_{\{100\}}^L$ почти для всех направлений, за исключением узких интервалов в окрестности направлений $[110]$, оказывается меньше Λ_{iso} . Поэтому для них преобладает эффект дефокусировки. Для медленной и быстрой поперечных мод $\Lambda_{\{100\}}^t > \Lambda_{iso}$, поэтому для них преобладает эффект фокусировки. Причем для медленной t_2 -моды эффект фокусировки проявляется в большей степени в направлениях, близких к $[110]$, а для быстрой t_1 -моды в направлениях, близких к $[100]$. В плоскости $\{110\}$ для медленной t_2 -моды $\Lambda_{\{110\}}^{t_2} > \Lambda_{iso}$, эффект фокусировки в нанопроводах калия проявляется для всех направлений, тогда как для быстрой t_1 -моды фокусировка реализуется только для направлений, близких к $[100]$. В этой плоскости для L -фононов эффект фокусировки доминирует в направлениях близких к $[111]$, а в направлениях $[100]$ для них преобладает эффект дефокусировки. Отметим, что для L -фононов в направлениях $[111]$ длина пробега $\Lambda_{\{110\}}^{L[111]}$ не только значительно больше Λ_{iso} , но и значительно превышает длину пробега медленной t_2 -моды (см. рисунок 10). Как видно из рисунка 10, преобладающий вклад в термоэдс увлечения нанопроводов вносит медленная t_2 -мода: её 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. [A14]): $C_V^{t_2} : C_V^{t_1} : C_V^L : C_V = 0.78 : 0.184 : 0.0366 : 1$. Отметим, что величины Λ_{ph}^{λ} и α_{drag}^{λ} достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов. Для медленной t_2 -моды направления фокусировки в кристаллах первого типа определяются углом $\theta_{max} = 0.58 \pm n\pi/2$ в плоскости $[001]$, которые соответствуют направлениям групповых скоростей в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях, а направления дефокусировки – $[111]$ (см. рисунок 10). Для L -фононов ситуация обратная: направления фокусировки и дефокусировки фононов меняются местами. Анизотропия вкладов в термоэдс увлечения медленной t_2 -моды и L -фононов достаточно велики:

$$\alpha_{\theta_{max}}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[100]}^{t_2\{100\}} : \alpha_{[110]}^{t_2\{110\}} : \alpha_{[111]}^{t_2\{110\}} = 2 : 1.5 : 1.4 : 1, \quad \alpha_{[111]}^{L\{110\}} : \alpha_{[110]}^{L\{100\}} : \alpha_{[100]}^{L\{100\}} = 2.5 : 1.9 : 1. \quad (17)$$

Однако направления дефокусировки и минимумы вклада t_2 -моды соответствуют направлениям фокусировки и максимумам вклада L -фононов. Они в значи-

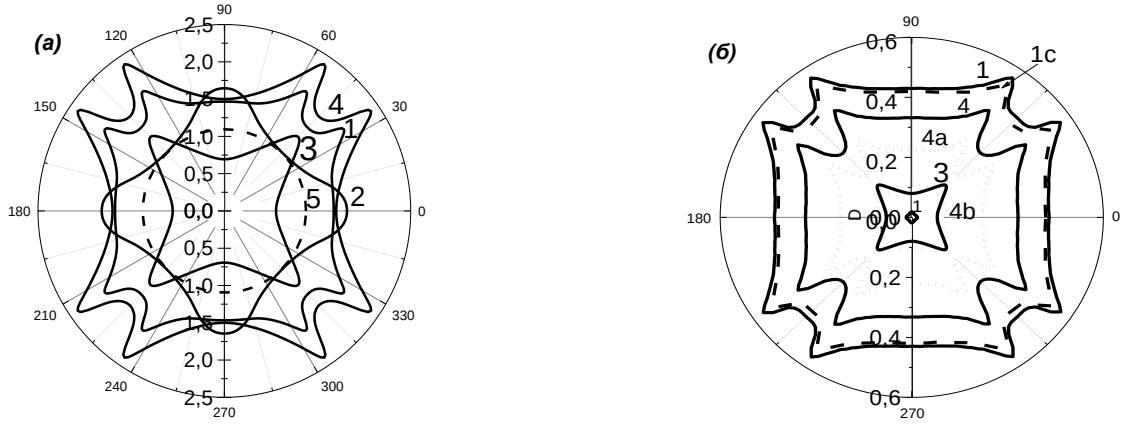


Рисунок 10 – Угловые зависимости средней длины пробега фононов (а) и термоэдс увлечения нанопроводов α_{drag} (мкВ/К) (б) – кривые 1, а также вкладов в них от L -фононов -кривые 2, от быстрых t_1 -мод -кривые 3 и от медленных t_2 -мод -кривые 4, а также вкладов от продольной -кривые 4а и сдвиговой -кривые 4b компоненты t_2 -моды для образцов калия с квадратным сечением $D=5 \cdot 10^{-6}$ см и длиной $L=50D$ в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости $\{100\}$. Кривая 5– длина пробега фононов, рассчитанная в режиме граничного рассеяния для модели изотропной среды. Штриховая кривая 1с - полная термоэдс с учетом объемных механизмов релаксации для образца K5 с $\varepsilon \approx 0.053$.

тельной степени компенсируют друг друга, и анизотропия полной термоэдс значительно уменьшается: $\alpha_{\theta_{\max}}^{\{100\}} : \alpha_{[110]}^{\{110\}} : \alpha_{[100]}^{\{100\}} : \alpha_{[111]}^{\{110\}} = 1.32 : 1.1 : 1.01 : 1$. Заметим, что в симметричных направлениях анизотропия термоэдс будет заметно меньше: $\alpha_{[110]}^{\{110\}} : \alpha_{[100]}^{\{100\}} : \alpha_{[111]}^{\{110\}} = 1.1 : 1.01 : 1$.

Исследование анизотропии термоэдс увлечения в нанопроводах в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов показало, что при увеличении поперечных размеров наноструктур от $D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см, благодаря более сильному рассеянию L -фононов на электронах, анизотропия термоэдс увлечения нанопроводов 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. При этом чем меньше концентрация дислокаций, тем больше максимальная анизотропия (см. рисунок 11). Такие значения анизотропии термоэдс вполне доступны экспериментальному определению. Из рисунка 11 видно, что анизотропия термоэдс в 30% достигается не только в режиме кнудсеновского течения фононного газа для $D < 10^{-5}$ см, но и при толщине образцов, на два порядка больших: $D \approx (0.4-2) \cdot 10^{-3}$ см. Отметим, что эта особенность анизотропии термоэдс существенно упрощает проблему экспериментальной проверки рассчитанных эффектов.

Рассмотрим влияние фокусировки фононов и сдвиговых волн на анизотропию термоэдс увлечения в нанопластинах калия и проанализируем особенности, обусловленные конкуренцией граничного и объёмных механизмов релаксации фононов, на основе результатов работы [A17]. Покажем, что в двух одинаковых нанопластинах прямоугольного сечения для направления градиента температуры $[011]$ фокусировка фононов приводит к зависимости термоэдс от ориентации широких граней. Для

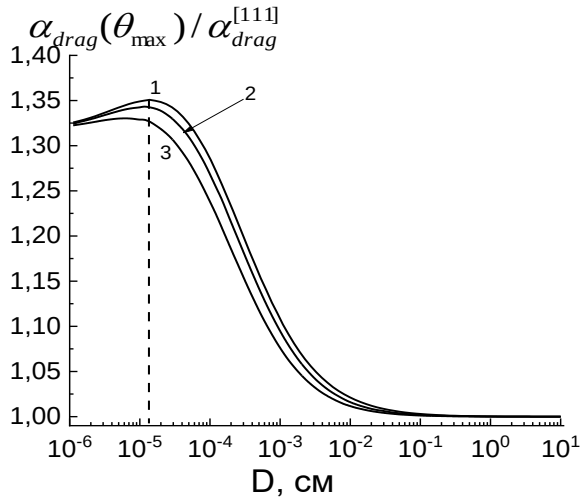


Рисунок 11 – Зависимости отношения термоэдс $\alpha_{drag}(\theta_{max})/\alpha_{drag}^{[111]}$ для направлений θ_{max} и $[111]$ от толщины образцов с квадратным сечением $L = 50D$, рассчитанные для кристаллов калия: с $\epsilon=0$ (кривая 1), К5 с $\epsilon \approx 0.027$ (кривая 2), К5 с $\epsilon \approx 0.053$ (кривая 3), К4 с $\epsilon \approx 0.1$ (кривая 4).

ориентации широких граней $\{001\}$ она оказалась больше, чем для ориентации $\{011\}$. Ориентационная анизотропия в значительной степени обусловлена конкуренцией вкладов медленной t_2 -моды и L -фононов. Сравним угловые зависимости термоэдс увлечения и длины свободного пробега фононов различной поляризации для кристаллов калия при вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$. Длины свободного пробега фононов разной поляризации имеют одинаковый порядок величины (см. рисунок 12). Отметим, что для градиента температуры в плоскости $\{110\}$ длина свободного пробега L -фононов в направлениях фокусировки $[111]$ заметно больше, чем для других колебательных мод. Из рисунка 12 видно, что угловые зависимости термоэдс увлечения и длины свободного пробега для L и t_2 -мод коррелируют. Обе величины достигают максимальных и минимальных значений в направлениях фокусировки и дефокусировки фононов, соответственно. Для медленной t_2 -моды – это направления $\theta_{max} = 0.58 \pm n\pi/2$ в плоскостях $\{100\}$, соответствующие групповым скоростям в точках нулевой кривизны на изоэнергетических поверхностях и направ-

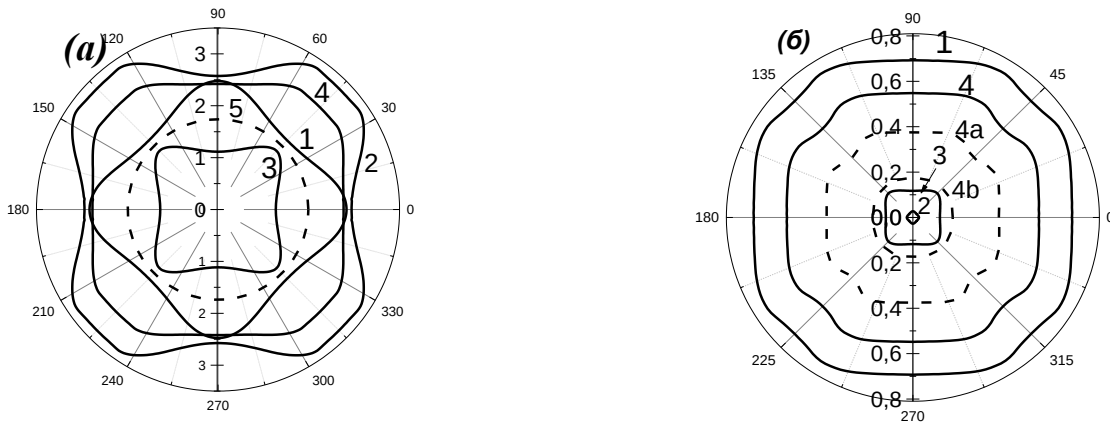


Рисунок 12 – Угловые зависимости приведенных длин пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[l(w)]}^{\{j\}\lambda} = \Lambda_{[l(w)]}^{\{j\}\lambda} / D$ (а) и термоэдс увлечения α_{drag} (мкВ/К) (б) для градиента температуры в плоскости $\{100\}$ – кривые 1, а также вкладов в них от L -фононов - кривые 2, от быстрых t_1 -мод - кривые 3 и от медленных t_2 -мод - кривые 4, а также вкладов от продольной (кривые 2а) и сдвиговой (кривые 2б) компоненты t_2 -моды, для нанопластин калия К5 с $\epsilon \approx 0.053$ с прямоугольным сечением при $D = 5 \cdot 10^{-6}$ см, $\mu = 3.33$ и $k_0 = 12.67$. Кривая 5 – средняя длина пробега фононов для модели изотропной среды.

лениях дефокусировки – $[111]$, соответственно. Для L -фононов – ситуация обратная: максимумы термоэдс и направления фокусировки – $[111]$, а минимумы – в направлениях дефокусировки – $[001]$ (см. [A17]).

Проанализируем изменение анизотропии термоэдс увлечения пластин калия в условиях конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов. С увеличением поперечного сечения скорость релаксации фононов на границах уменьшается, а роль объёмных механизмов возрастает. В результате анизотропия вкладов продольной и квазипоперечных мод в термоэдс увлечения монотонно уменьшается (см. рисунок 13). Из рисунка видно, что кривая 4 соответствует зависимости максимальной величины термоэдс увлечения для образца K4 с $\varepsilon \approx 0$ от толщины. При $D \geq 10^{-2}$ 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 данными¹⁸ для образцов прямоугольного сечения $D \times W = 0.15 \times 0.5$ см². Это свидетельствует о корректности учета влияния фокусировки фононов на термоэдс увлечения в пластинах калия. В области малых значений поперечного сечения $D \leq 10^{-4}$ см доминирует граничное рассеяние, и кривые, соответствующие различным концентрациям дислокаций, для каждого направления теплового потока сливаются в одну (см. рисунок 13, кривые 4, 5, 6). Для больших значений поперечного сечения $D \geq 10^{-3}$ см кривые, соответствующие образцам с различными концентрациями дислокаций, расходятся, и при $D \geq 10^{-2}$ см выходят на насыщение, соответствующее значениям для объёмных образцов (см. рисунок 13). Это свидетельствует о корректности учета влияния фокусировки фононов на термоэдс увлечения в пластинах калия.

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 монокри-

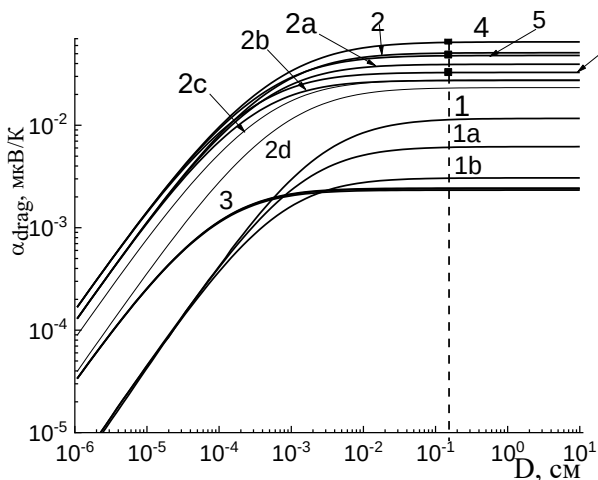


Рисунок 13 – Зависимости полной термоэдс α_{drag} (мкВ/К) (кривые 4, 5, 6), а также вкладов в термоэдс увлечения от быстрых $\alpha_{drag}^{t_1}$ (кривые 1, 1a, 1b), медленных квазипоперечных $\alpha_{drag}^{t_2}$ (кривые 2, 2a, 2b) и продольных фононов α_{drag}^L (кривые 3) от толщины D для пластин с $\mu=3.3$ и $k_0=12.15$ для направления градиента температуры под углом θ_{max} в плоскости $\{100\}$, рассчитанных для кристаллов: K4 с $\varepsilon \approx 0.1$ – кривые 1b, 2b, 4b, K5 с $\varepsilon \approx 0.053$ – кривые 1a, 2a, 3a, 4a, без дислокаций – кривые 1, 2, 2c, 2d, 3, 4, кривая 2c – вклад продольной компоненты, кривая 2d – вклад сдвиговой компоненты медленной t_2 -моды.

сталлических пластинах калия. Физическими причинами ориентационного эффекта в термоэдс увлечения при низких температурах является влияние упругой анизотропии на распространение фононов медленной t_2 -моды и L -фононов в нанопластинах калия, а также конкуренцией вкладов t_2 -моды и L -фононов при увеличении поперечных размеров. Ориентационный эффект представляет научный интерес, но его величина при $\mu=3.3$ относительно невелика. Однако с увеличением ширины пластины (параметра μ) при фиксированной толщине величина ориентационного параметра $\delta_{[110]}(\mu, D)$ возрастает, и при $\mu \geq \mu^*$ он становится больше, чем $\delta_{[111]}^{\max}(\mu, D)$. В отличие от второго эффекта МакКарди в решеточной теплопроводности кремниевых пластинах⁵ (см. [A26]), в пластинах калия зависимость термоэдс увлечения для направления градиента температуры $[011]$ от ориентации широких граней обусловлена конкуренцией вкладов медленной t_2 -моды и L -фононов. Связано это с тем, что для градиента температуры в плоскости $\{011\}$ термоэдс увлечения при $D=8 \cdot 10^{-5}$ см значительно изотропизируется, а её угловые зависимости при увеличении ширины пленки (параметра μ) становятся эллипсоидальными с минимальными значениями вдоль направлений $[011]$. Её минимум переходит из направления $[111]$ для $\mu=3.3$ в направление $[011]$ при $\mu \geq \mu^* \approx 5$. В итоге для нанопластин калия К5 с $\varepsilon=0$ при $D=8 \cdot 10^{-5}$ см, $k_0=12.67$ и $\mu=10$ ориентационная анизотропия возрастает до 37% (см. рисунок 14). Для образцов калия К4 с максимальной концентрацией дислокаций $\varepsilon \approx 0.1$ при $\mu=10$ ориентационная анизотропия уменьшается до 35%. Таким образом, ориентационный эффект вполне доступен для экспериментальных исследований.

Рассмотрим влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс увлечения в пленках калия 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 $k_0 \gg 1$ и $\mu \gg 1$. Проанализируем угловые зависимости термоэдс увлечения и длины пробега фононов для трех случаев, когда тепловой поток вращается в плоскостях пленок: (1) плоскость пленки совпадает с плоскостью грани куба $\{J\} = \{100\}$, (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 $[11\bar{2}]$. Рассмотрим угловые зависимости термоэдс увлечения и длины пробега фононов, рассчитанные при вращении градиента температуры в плоскостях пленок с ориентациями $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ (см. рисунок 15). Отметим следующие особенности: в квадратных пленках ($L=W$) с ориентациями плоскостей $\{100\}$ и $\{111\}$ термоэдс увлечения и средняя длина пробега фононов являются изотропными. Однако для пленок с ориентацией $\{110\}$ они имеют эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления $[100]$. Проанализируем физические причины, которые приводят к таким зависимостям. Согласно теории Казимира–МакКарди^{1,5} 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. Нами показано, что анизотропия термоэдс увлечения обусловлена влиянием фокусировки на распространение акустических мод в квадратных пленках, имеющих различную ори-

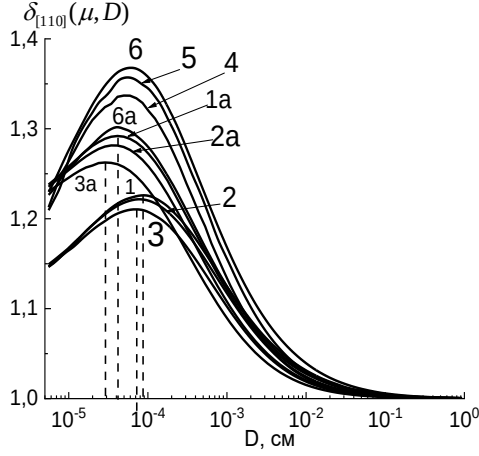


Рисунок 14 – Зависимости параметров $\delta_{[111]}^{\max}(\mu, D)$ (кривые 1а, 2а, 3а, 6а) и $\delta_{[110]}(\mu, D)$ (кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6) от толщины D для нанопластинок калия с $k_0=12.67$: К5 с $\varepsilon=0$ (кривые 1, 1а, 6а, 6), с $\varepsilon \approx 0.053$ (кривые 2, 2а, 5), К4 с $\varepsilon \approx 0.1$ (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 $\mu=10$.

ентацию. Для этого перейдем в систему координат, связанную с пленкой, и проанализируем распределение электронного и фононного потоков по углам $\Phi(\theta, \varphi)$ в плоскостях пленок, имеющих различную ориентацию, а также их распределение по углам $\Theta(\theta, \varphi)$ в поперечных сечениях, включающих направление теплового потока аналогичным тому, как это сделано в [A26, A27] для потока фононов в диэлектрических нанопленках:

$$\alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\Phi \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi), \quad \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Phi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \Theta) \alpha_{drag[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\Theta, \Phi). \quad (18)$$

Анализ показал, что актуальный интервал углов, дающий основной вклад при усреднении по углам Φ в плоскостях пленок с различными ориентациями, составляет $\Delta\Phi \approx \pi/2$. В кристаллах калия в плоскости $\{100\}$ угол между направлениями фокусировки и дефокусировки для t_2 -моды составляет $\pi/6 < \Delta\varphi < \pi/4$. Для L -фононов угол между этими направлениями в пленках с плоскостью $\{100\}$ составляет $\Delta\varphi = \pi/4$. В пленках с плоскостью $\{111\}$ угол между направлениями фокусировки $[110]$ и дефокусировки $[11\bar{2}]$ для t_2 -моды и L -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 15(а, в), (г, е)). Таким образом, анизотропия термоэдс увлечения и длины свободного пробега фононов в квадратных пленках с плоскостями $\{100\}$ и $\{111\}$ в режиме граничного рассеяния полностью определяется ориентацией плоскостей пленок. Другая ситуация складывается в пленках с ориентацией $\{110\}$, где зависимости термоэдс увлечения и длины свободного пробега имеют эллипсоидальный вид с длинными осями вдоль направлений $[100]$ для t_2 -моды и вдоль направлений $[110]$ для L -фононов. Угол между направлениями фокусировки и дефокусировки для t_2 -моды и L -фононов составляет $\Delta\varphi = \pi/2$. Для произвольного направления градиента температур при усреднении по углам в плоскости пленки $\{110\}$ оба 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 15 б, д). Поэтому термоэдс в направлении $[100]$, в котором фокусируется t_2 -мода, оказывается на 20% больше, чем в $[110]$. Как и в случае нанопла-

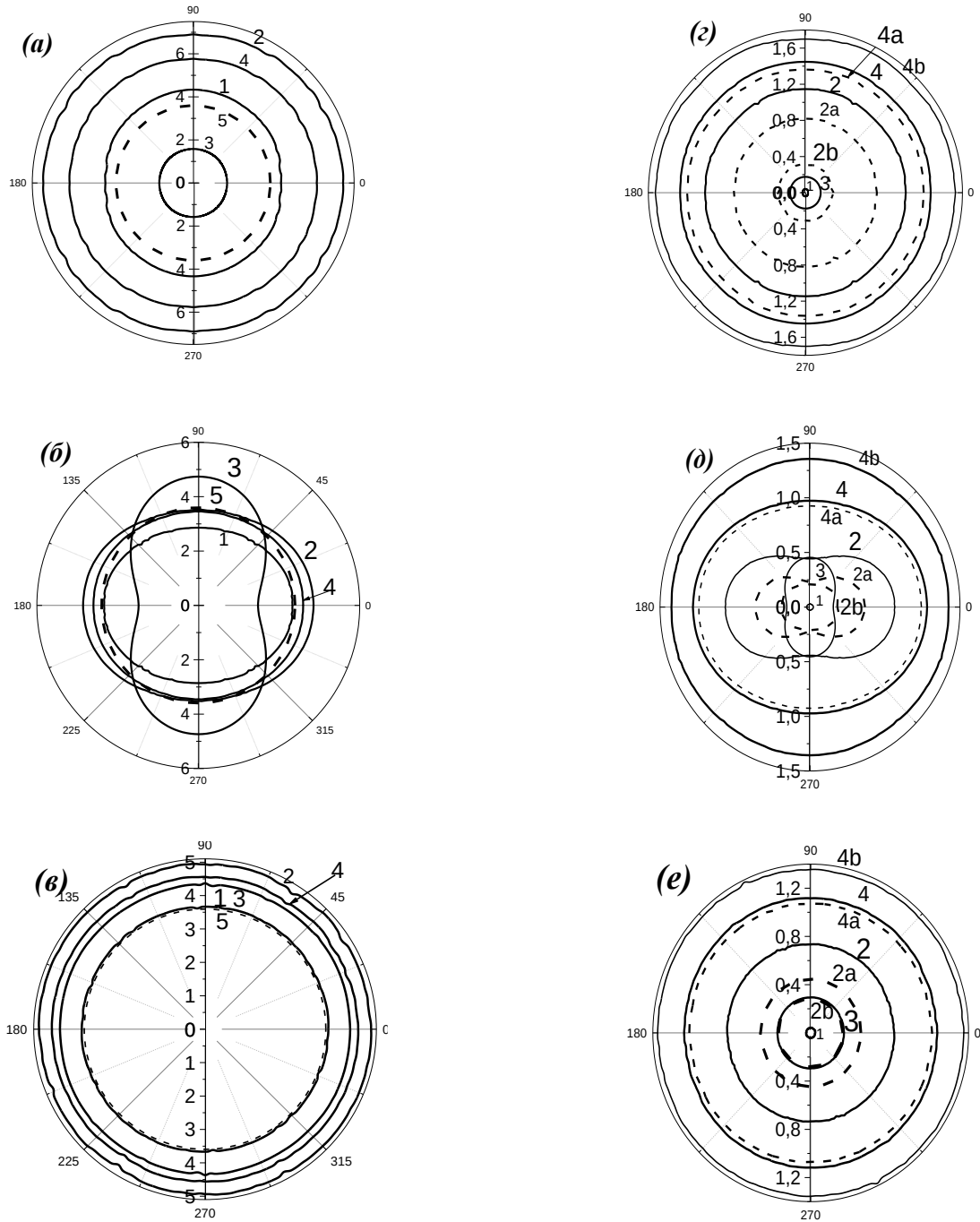


Рисунок 15 – Угловые зависимости приведенных длин свободного пробега фононов (а, б, в) и термоэдс увлечения (нВ/К) (г, д, е) в квадратных пленках калия с параметрами $L = W = 100D$ и $D = 50$ нм и ориентациями плоскостей $\{100\}$ (а, г), $\{110\}$ (б, д) и $\{111\}$ (в, е). Кривые 1 – для быстрой t_1 -моды, 2 – для медленной t_2 -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.

стин, увеличение толщины квадратных пленок за счет конкуренции граничного и объёмных механизмов релаксации фононов для медленной t_2 -моды и L -фононов анизотропия термоэдс, характеризуемая параметрами $\delta_{[110]}(D) = \alpha_{[110]}^{\{100\}} / \alpha_{[110]}^{\{110\}}$;

$\delta^{\{011\}}(D) = \alpha_{\{001\}}^{\{110\}} / \alpha_{\{011\}}^{\{110\}}$ и $\delta^{\{001\}}(D) = \alpha_{\{001\}}^{\{100\}} / \alpha_{\{001\}}^{\{111\}}$, изменяется немонотонным образом (см. рисунок 16). Механизм этого эффекта- тот же самый: минимальные величины термоэдс $\alpha_{drag\{110\}}^{\{110\}}$ и $\alpha_{drag\{110\}}^{\{111\}}$, которые в значительной степени определяются L -фононами, убывают быстрее, чем максимальные значения термоэдс $\alpha_{drag\{100\}}$ и $\alpha_{drag\{110\}}^{\{100\}}$, которые определяются главным образом вкладом t_2 -моды. Параметр $\delta_{\{110\}}(D) = \alpha_{\{110\}}^{\{100\}} / \alpha_{\{110\}}^{\{110\}}$ определяет отношение термоэдс увлечения в пленках с ориентациями $\{001\}$ и $\{011\}$ для направления 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 t_2 -моды имеет максимальное значение. Он превосходит вклад L -фононов в 6.9 раза (см. рисунок 16). С увеличением толщины, благодаря более сильной релаксации L -фононов на электронах минимальные значения термоэдс увлечения $\alpha_{drag\{110\}}^{\{110\}}$ убывают значительно быстрее, чем максимальные значения $\alpha_{drag\{100\}}^{\{110\}}$, определяемые главным образом вкладом t_2 -моды. В результате ориентационная анизотропия термоэдс $\beta_{\{110\}}(D)$ для калия К5 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 16, кривая 1). Дополнительное рассеяние на дислокациях для кристаллов К4 с деформацией $\varepsilon=0.1$ приводит к уменьшению анизотропии термоэдс: величина максимума уменьшается до 52% (см. рисунок 16, кривая 2). Аналогичным образом с толщиной изменяется параметр $\delta^{\{011\}}(D) = \alpha_{\{001\}}^{\{110\}} / \alpha_{\{011\}}^{\{110\}}$, определяющий анизотропию термоэдс увлечения в квадратных пленках с ориентацией $\{011\}$ (см. рисунок 16, кривые 3 и 4). Физическая причина,

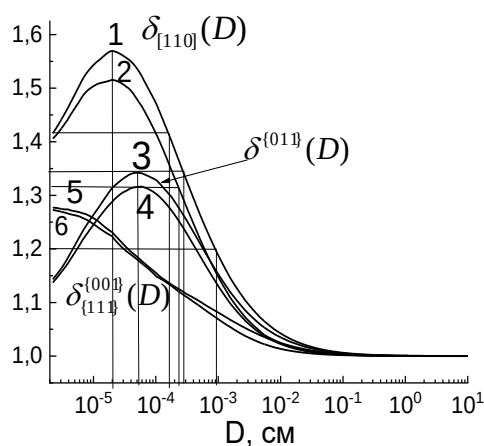


Рисунок 16 – Зависимости анизотропии термоэдс квадратных пленок с параметрами $\mu=100$ и $k_0=50$ от толщины D в кристаллах калия К5 с $\varepsilon=0$ (кривые 1, 3, 5) и $\varepsilon=0.1$ (кривые 2, 4, 6) для параметров: $\delta_{\{110\}}(D) = \alpha_{\{110\}}^{\{100\}} / \alpha_{\{110\}}^{\{110\}}$ (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).

приводящая к немонотонной зависимости параметра $\delta^{(011)}(D)$ от толщины пленки – та же самая, что и в предыдущем случае. Она обусловлена конкуренцией вкладов t_2 -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 $[011]$.

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.

В шестой главе исследовано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононную релаксацию и электросопротивление благородных металлов в рамках теории Блоха-Грюнайзена. Рассчитаны спектр, векторы поляризации фононов и определена плотность фононных состояний. Построены изоэнергетические поверхности для фононов и проанализировано влияние фокусировки фононов на электрон-фононную релаксацию в БМ. 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^{26,27} рассчитаны спектр, векторы поляризации фононов, однако матричный элемент электрон-фононного взаимодействия учитывался в приближении деформационного потенциала: в виде квадрата скалярного произведения волнового вектора на вектор поляризации фонона. Это позволило учесть только взаимодействие электрона с продольной компонентой квазипоперечных мод. Результаты расчета электросопротивления благородных металлов, полученные в работах^{26,27} оказались значительно ниже экспериментальных данных^{28,29}. При температурах $T \approx 300$ К это расхождение превышает 200-300%.

Нами предложен новый метод определения константы E_{0t} , который основан на очень простой, но интересной идее, высказанной Займаном¹⁰, который показал, что в области высоких температур, 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. Вторым обстоятельством, которое позволяет определить константу E_{0t} является различный тип взаимодействия электронов с продольными и поперечными компонентами колебательных мод. Дело в том, что взаимодействие электронов с продольными компонентами обусловлено деформациями сжатия и растяжения и описывается потенциальным полем, тогда как рассеяние электронов на сдвиговых волнах –

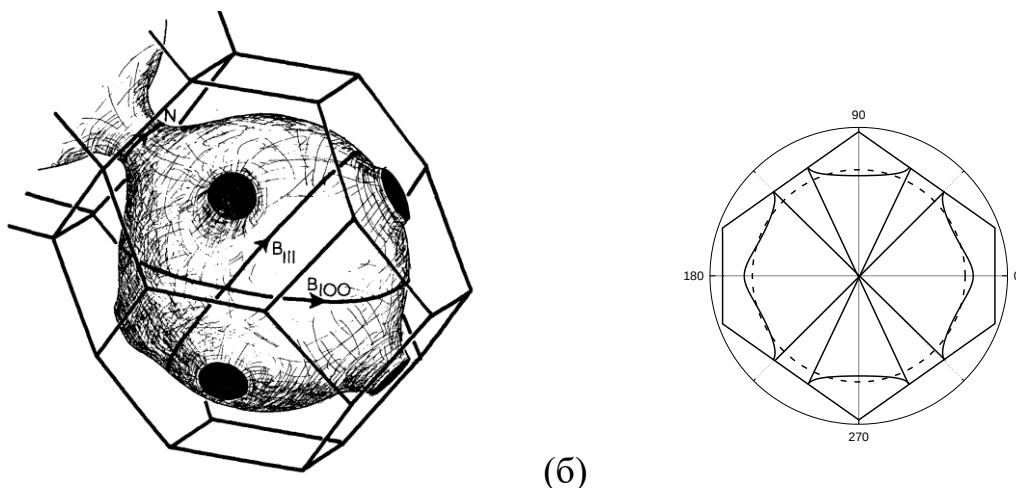
²⁶ Singh A.K. and Sharma P.K. Electrical Resistivity of Noble Metals by Krebs's Method // Phys. Stat. sol. 1969. V.32. P.209-215.

²⁷ Pal S. Electrical Resistivity of Noble Metals // Can. J. Phys. 1973. V.51. P.2225-2232.

²⁸ Matula R.A. Electrical resistivity of copper, gold, palladium, and silver // J. Phys. Chem. Ref. data. 1979. V.8. P.1147.

²⁹ Lawrence W.E. Electron-electron scattering in the low-temperature resistivity of the noble metals // Phys. Rev. B. 1976. V.13. P.5316-5319.

вихревым полем¹¹. Эти поля имеют разную природу и поэтому не интерферируют [A14]. Вследствие этого они входят в матричный элемент электрон-фоонного взаимодействия аддитивным образом [A14] и их вклады в высокотемпературной области могут быть выделены. Поскольку константы деформационного взаимодействия определяются энергией Ферми $E_{0L} \approx (n/N(\varepsilon_F))$, то константы E_{0t} могут быть определены из согласования результатов расчета электросопротивления с экспериментальными данными при высоких температурах $T \gg \theta_D$. Константы E_{0t} для кристаллов Au, Ag, Cu равны 1.5, 0.92, 2.1 эВ. Рассчитаны поверхности Ферми в благородных металлах. Анализ поверхности Ферми при использовании различных приближений показал, что ее отклонение от изотропного приближения мало, и в среднем составляет приблизительно 5%. На поверхности Ферми благородных металлов возникают 8 перешейков между соседними зонами Бриллюэна в окрестности направлений [111] (см. рисунок 17а). Площадь этих дырок на поверхности Ферми мала: их суммарная площадь составляет 0.036, 0.063 и 0.08% от полной поверхности Ферми для кристаллов Au, Ag и Cu, соответственно. Процессы электрон-фоонного 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 поверхностей Ферми³⁰ показали, что суммарный объём конусов пустых состояний, которые опираются на области шеек между зонами Бриллюэна, мал по сравнению с полным объёмом сферы Ферми. Однако, не смотря на малость областей шеек между соседними поверхностями Ферми, они могут играть важную роль в релаксации импульса электронов и фононов в благородных металлах. Их учет необходим при исследовании влияния резистивных процессов электрон-фоонного и фонон-электронного переброса на взаимное увлечение электронов и фононов в благородных металлах. Эти процессы не вымораживаются и могут происходить при любой сколь угодно низкой температуре.



(а)

(б)

Рисунок 17 – (а) Поверхность Ферми меди взята из³¹. (б) Сплошные кривые - сечение поверхности Ферми меди плоскостью {110}, согласно работам³⁰, штриховая кривая – изотропная аппроксимация.

³⁰ J. Roaf D. The Fermi Surfaces of Copper, Silver and Gold II. Calculation of the Fermi Surfaces // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 1962. V.255. P.135-152.

³¹ Ziman, J.M. The ordinary transport properties of the noble metals // Advances in Physics. 961. V. 10. P.1-56.

Результат расчета фононной части электросопротивления (как и в случае калия) можно представить в виде произведения интеграла от угловой части B_Ω^λ на интеграл B_Z^λ от функции распределения наиболее эффективных для неё фононов $\Phi(Z_q^\lambda)$ (см. (12)). При температурах, гораздо меньших температуры Дебая $T \ll \theta_D^\lambda$, верхний предел интегрирования оказывается гораздо больше единицы $Z_D^\lambda = \theta_D^\lambda / T \gg 1$. Его можно распространить до бесконечности для всех мод. В этом случае электросопротивление для всех мод будет следовать зависимости, характерной для теории Блоха-Грюнайна^{7,8}:

$$\rho_{e-ph}(T) \approx B_1 T^5, \quad B_1 = \left\{ A_\infty \frac{(m_F)^2 (k_B)^5}{6\pi^3 \hbar^7 e^2 \rho n_e} \right\} \sum_\lambda B^\lambda, \quad A_\infty = \int_0^\infty dZ_q^\lambda \Phi(Z_q^\lambda), \quad B^\lambda = \int d\Omega_q \frac{(E_{eff}^\lambda(\theta, \varphi))^2}{\{S^\lambda(\theta, \varphi)\}^6}. \quad (19)$$

Отношение вкладов различных мод определяется отношениями угловых коэффициентов:

$$\rho_{e-ph}^{t_2} : \rho_{e-ph}^{t_1} : \rho_{e-ph}^L = B^{t_2} : B^{t_1} : B^L. \quad (20)$$

Для благородных металлов при низких температурах получим:

$$(Au) B_1^{t_2} : B_1^{t_1} : B_1^L = 0.845 : 0.15 : 0.005, \quad (Ag) B_1^{t_2} : B_1^{t_1} : B_1^L = 0.84 : 0.13 : 0.03, \quad (Cu) B_1^{t_2} : B_1^{t_1} : B_1^L = 0.86 : 0.12 : 0.02.$$

Таким образом, квазипоперечные фононы вносят доминирующий вклад в электрон-фононную релаксацию и электросопротивление БМ. Их суммарный вклад 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 (19), 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 t_2 -моды для золота в 3.8 раза меньше, чем для продольных фононов, а отношение усредненных значений дает $\langle S^L \rangle / \langle S^{t_2} \rangle \approx 3$. Шестая степень этого отношения для золота дает величину на два порядка большую. Поэтому t_2 -мода вносит доминирующий вклад в релаксацию электронного импульса. Результаты расчета температурных зависимостей электросопротивления благородных металлов хорошо согласуются с экспериментальными данными^{28,29} (см. рисунок 18). Отметим, что вклады всех мод в электросопротивление следуют теории Блоха-Грюнайна: при низких температурах $T \ll \theta_D^\lambda$ рассеяние электронов на фононах неупругое и $\rho_{e-ph}(T) \approx B_1^\lambda T^5$. В области высоких температур $T \gg \theta_D^\lambda$ рассеяние электронов на фононах можно считать упругим⁷ и все вклады следуют линейной зависимости от температуры. В среднем отклонения рассчитанных значений от экспериментальных данных^{28,29} для кристаллов Au, Ag и Cu не превышают 10-15% (см. рисунок 18 а, б, в). При этом для кристаллов Au и Cu во всём интервале температур доминирующий вклад в электросопротивление вносит медленная t_2 -мода, а расхождение с экспериментом в интервале 700-1000 К увеличивается до 15-30%, что, по-видимому, связано с рассеянием на термоактивированных дефектах. Соотношения вкладов при переходе в высокотемпературную область $T \gg \theta_D^\lambda$, 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

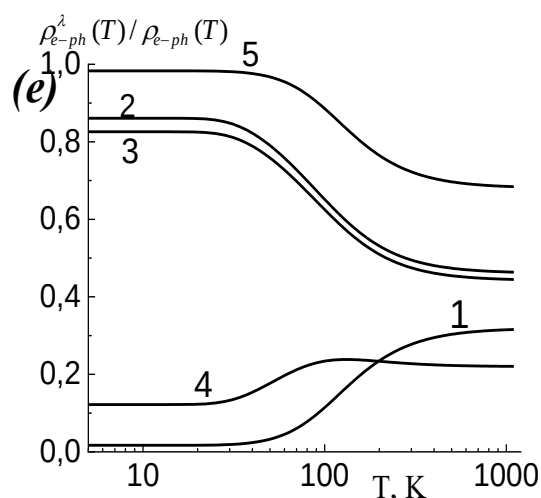
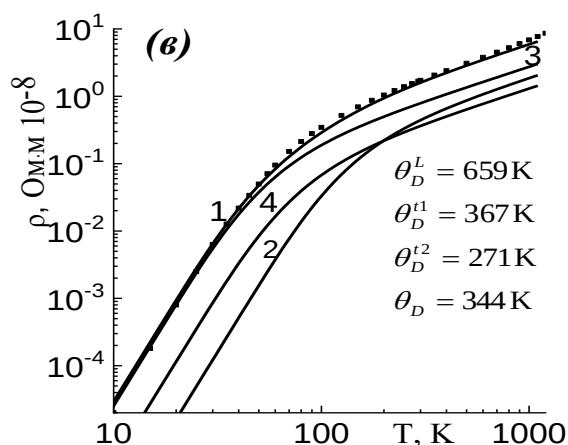
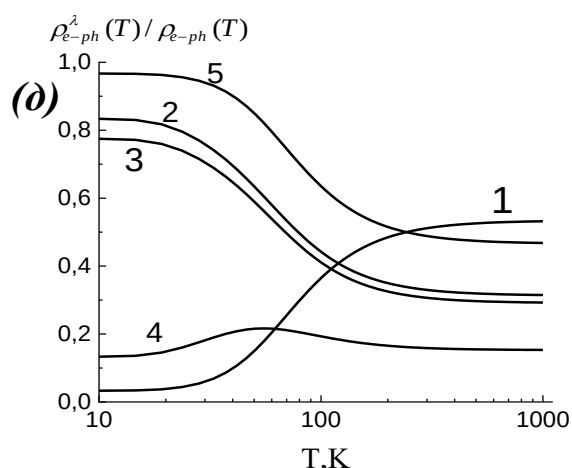
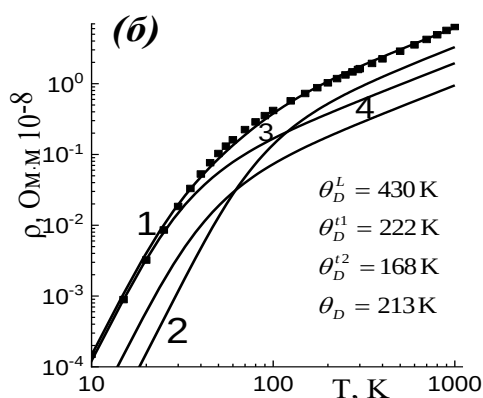
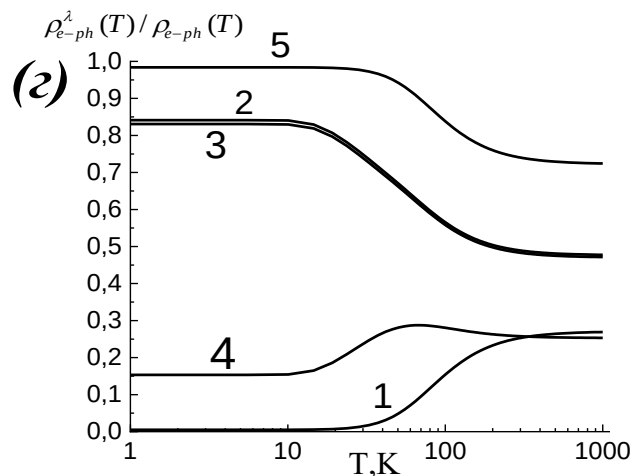
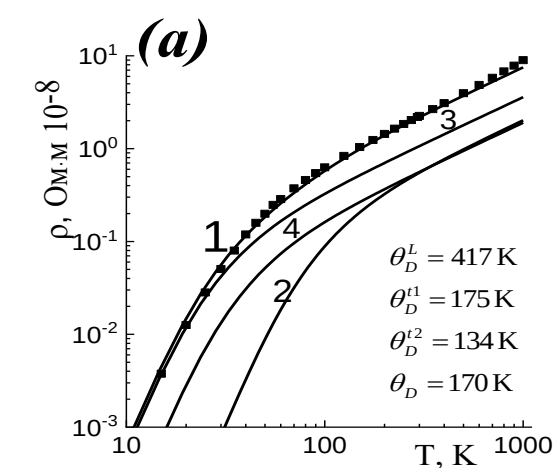


Рисунок 18 – Температурные зависимости электросопротивления - рисунки (а), (б) и (в): (а) - золото, (б) - серебро и (в) - медь - кривые 1, а также вклады от продольных фононов - кривые 2, медленной t_2 -моды - кривые 3, быстрой t_1 -моды - кривые 4. Символы – экспериментальные данные из работы²⁸. Температурные зависимости относительных вкладов в электросопротивление –(г), (д) и (е): золото -(г), серебро - (д) и медь - (е): кривая 1- для продольных фононов, 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 вклада квазипоперечных фононов.

для серебра, для которого в высокотемпературном пределе вклад продольных фононов возрастает от 3% почти до 53%. Следует отметить интересную особенность полученных результатов: вклады всех мод в электросопротивление как при низких температурах $T \ll \theta_D^{\lambda}$, так и при высоких $T \gg \theta_D^{\lambda}$ имеют одинаковую зависимость от температуры. Поэтому из рисунка 18 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.

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 направлениями 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 минимумов в кристаллах второго типа. Определены области углов, соответствующие фокусировке и дефокусировке фононов в металлических и диэлектрических кристаллах кубической симметрии.

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 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 CaF_2) фокусировка медленной t_2 -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 CaF_2) – 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 данными³² определена константа связи электронов со сдвиговыми волнами. Учет этого механизма релаксации позволил согласовать температурные зависимости термоэдс калия с различной концентрацией дислокаций с экспериментальными данными³² 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 $T \ll \theta_D$, на порядок величины превышают вклад про-

³² Fletcher R. Scattering of phonons by dislocations in potassium// Phys. Rev. B. 1987. V.36. P.3042-3051.

дольных фононов. Их вклад в термоэдс увлечения и электросопротивление калия составляет 92%, тогда как на продольные фононы остается 8%. При этом релаксация на продольной компоненте медленной квазипоперечной моды обеспечивает 58% электросопротивления, тогда как сдвиговая компонента – 32%, что в 4 раза больше вклада продольных фононов. Однако при высоких температурах ($T \gg \theta_D$), 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 доминирующей роли медленной квазипоперечной 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 $D < 5 \cdot 10^{-6}$ 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 $\kappa(T) \approx C T^3$. 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: $\alpha_{drag}(T) \approx A T^3$ и $\kappa(T) \approx B T^2$. При низких температурах анизотропия термоэдс увлечения в наноструктурах калия обусловлена конкуренцией вкладов медленной t_2 -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

большой 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 $T \ll \theta_D$ 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 Au, Ag и Cu, 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 ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- A1. 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.
- A2. 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.
- A3. 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.
- A4. 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.
- A5. 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.
- A7. 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.

- A8. 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.
- A9. 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.
- A10. 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.
- A11. 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.
- A13. 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.
- A14. 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.
- A16. 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.
- A19. 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.
- A25. 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 p. – Библиогр.: с.202-208. – ISBN 978-3-11-067039-4. – Текст: непосредственный.
- A27. 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.