

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М. Н. МИХЕЕВА
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

БАХАРЕВ СЕРГЕЙ МИХАЙЛОВИЧ

**ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И ФОНОННЫЙ ТРАНСПОРТ В
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБЪЕМНЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ
МАТЕРИАЛАХ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ**

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, гнс
Кулеев И.Г.

Екатеринбург – 2015

Содержание

Введение	4
1 Распространение упругих волн и фокусировка в кубических кристаллах	15
1.1 Модель анизотропного континуума. Спектр и вектора поляризации фононов	16
1.2 Аппроксимация спектра тепловых фононов в кубических кристаллах	26
1.3 Расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge с использованием аппроксимационного спектра фононов	31
1.4 Групповая скорость и фокусировка фононов в кубических кристаллах	34
1.5 Коэффициент усиления потока фононов	43
1.6 Выводы	50
2 Времена релаксации при диффузном рассеянии фононов на границах образца . . .	51
2.1 Времена релаксации и длины свободного пробега для кнудсеновского течения фононного газа в образцах бесконечной длины	52
2.2 Времена релаксации и длины свободного пробега для кнудсеновского течения фононного газа в образцах конечной длины	58
2.3 Режим граничного рассеяния. Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических образцах кремния	63
2.4 Выводы	70
3 Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности объемных кремниевых образцов	71
3.1 Влияние дисперсии фононов на температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si в режиме граничного рассеяния	72
3.2 Механизмы релаксации и теплопроводность кристаллов кремния	76
3.3 Сравнение результатов расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными для образцов Si	81
3.4 Анизотропия теплопроводности и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра	87
3.5 Выводы	91
4 Анизотропия теплопроводности монокристаллических пленок и нанопроводов при низких температурах	92

4.1	Длины свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах	94
4.2	Зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров пленок и нанопроводов с различным типом анизотропии упругой энергии	97
4.3	Анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах двух типов	103
4.4	Выводы	108
5	Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов и пленок	110
5.1	Фононный транспорт в кремниевых нанопроводах	111
5.1.1	Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов	112
5.1.2	Анизотропия теплопроводности кремниевых нанопроводов	119
5.2	Фононный транспорт в кремниевых пленках	122
5.2.1	Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок	122
5.2.2	Анизотропия теплопроводности кремниевых пленок	129
5.3	Выводы	133
	Заключение	135
	Приложение А. Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и решеточная теплопроводность кубических кристаллов	138
	Список работ автора	141
	Литература	144

Введение

Диссертация посвящена решению одной из фундаментальных проблем физики конденсированного состояния — исследованию физических процессов, определяющих фононный транспорт в объемных и наноразмерных образцах кубической симметрии. Важным аспектом этой проблемы является изучение фокусировки, дисперсии и механизмов релаксации импульса фононов, обуславливающих зависимости кинетических коэффициентов от температуры.

В изотропном твердом теле и кубических кристаллах распространение тепла подчиняется закону Фурье:

$$\mathbf{h} = -\kappa \nabla T,$$

где \mathbf{h} - вектор, величина которого равна потоку тепла через единичное сечение, перпендикулярное \mathbf{h} , T - температура, κ - коэффициент теплопроводности, а знак "минус" в правой части связан с тем, что тепло течет в направлении, противоположном градиенту температуры, т. е. от горячей области к холодной. Оператор

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Теплопроводность измеряется, как правило, методом стационарного продольного теплового потока [1–3]. В простейшем эксперименте (см. рис. 1) нагреватель приклеивается прямо к торцу образца, а противоположный конец зажимается в хладостоке [3]. Термометры закрепляются в двух местах вдоль образца на расстоянии L друг от друга, и измеряется разность их показаний ΔT . После установления стационарного состояния (распределения температур и потока тепла) коэффициент теплопроводности κ определяется делением тепловой мощности ΔQ , выделяемой в нагревателе, на площадь поперечного сечения образца и на градиент температуры ($\Delta T/L = (T_2 - T_1)/L$):

$$\kappa = \Delta Q L / [(T_2 - T_1) S_C].$$

Если разность ΔT не слишком велика, то определяемое значение κ будет соответствовать средней температуре между термометрами, даже если κ сильно зависит от температуры [1]. Метод стационарного продольного теплового потока можно использовать, если излучение тепла через боковые грани мало и им можно пренебречь. Тогда все тепло, получаемое от нагревателя, будет доходить до хладостока.

В связи с развитием технологии и широким использованием нанопленок и нанопроводов в микроэлектронике значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств [4–10]. Особенности фононного транспорта в таких структурах обусловлены тем, что длины свободного пробега фононов в широком температурном интервале оказываются больше или

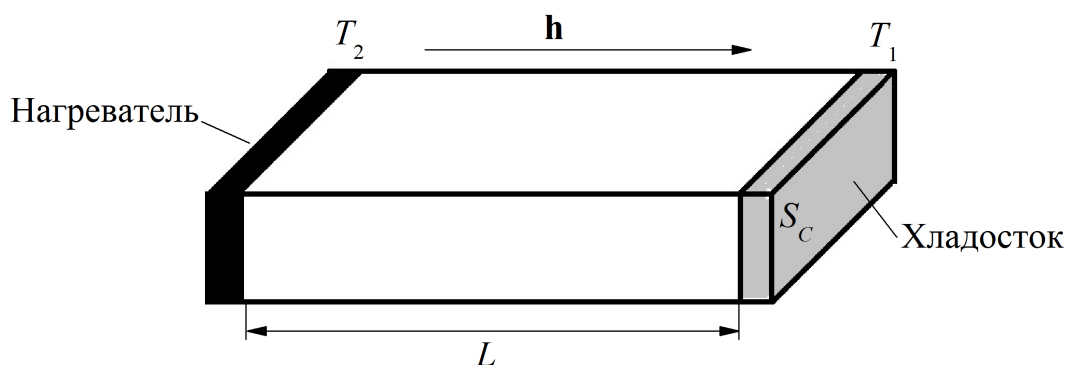


Рисунок 1. Принципиальная схема для измерения теплопроводности методом стационарного продольного теплового потока.

сравнимы с характерными размерами наноразмерного образца. Поэтому рассеяние фононов на границах играет важную роль в теплосопротивлении наноразмерных материалов в интервале температур от гелиевых до комнатных [11]. В случае, когда длина свободного пробега фононов оказывается порядка наименьшего размера образца, то ее величина определяется характером взаимодействия фононов с поверхностью. Такую ситуацию, когда единственным механизмом релаксации является диффузное рассеяние фононов на границах, принято называть режимом граничного рассеяния фононов.

При низких температурах, когда единственным механизмом релаксации является рассеяние фононов на границах образца, распространение потока тепла по диэлектрическому стержню, согласно работам [1, 12], можно рассматривать аналогично анализу течения газа по трубе. В случае потока разреженного молекулярного газа по трубе можно пренебречь столкновениями между молекулами газа и считать, что поток определяется только тем, каким образом молекулы рассеиваются на стенках трубы. В случае потока фононов при достаточно низких температурах из-за вымораживания фонон-фононных механизмов релаксации можно пренебречь взаимодействием фононов и рассматривать поток фононов аналогично потоку разреженного молекулярного газа. Кнудсен [13] в 1909 году проанализировал движение сильно разреженного газа по бесконечной трубе круглого сечения и показал, что при диффузном рассеянии молекул газа на границах, средняя длина свободного пробега молекул равна диаметру трубы.

Задачу о теплопроводности тонкого диэлектрического стержня бесконечной длины впервые рассмотрел Казимир [14] в 1938 г. Он проанализировал случай изотропного континуума, когда рассеяние фононов на границах образца носит чисто диффузный характер, т.е. все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Казимир нашел, что длина пробега фононов в цилиндрическом стержне равна его диаметру. Полученный результат совпадает с результатом Кнудсена [13] для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Поэтому режим граничного рассеяния фононов получил название кнудсеновского течения фононного газа [1, 12].

Позже Берман с коллегами [15, 16] рассмотрели влияние частично зеркального отражения фононов от поверхности образца и его конечной длины L на теплопроводность в режиме граничного рассеяния. Было показано, что учет конечной длины приводит к уменьшению теплопроводности по сравнению с бесконечным образцом на величину D/L (D – диаметр стержня). Однако аналитических выражений для поправок к теплопроводности из-за конечной длины образца приведено не было. Отметим также, что для бесконечно длинных стержней с прямоугольным сечением $D_1 \times D_2$, где D_1 и D_2 – размеры сторон прямоугольника, были получены формулы для средней длины свободного пробега фононов для чисто диффузного [3, 17] и частично зеркального [18] рассеяния от поверхности стержня. В 2011 году были теоретически рассмотрены случаи стержней с треугольным, гексагональным и другими сечениями [19], поскольку некоторые нанопровода имеют такие профили.

Анизотропия упругих свойств кубических кристаллов приводит к ряду новых эффектов в фононном транспорте. Одним из таких эффектов является фокусировка фононов, т. е. возникновение направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды [20].

Экспериментальные исследования, проведенные в работе МакКарди [17], 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 кристаллов Si с квадратным сечением величина теплопроводности при низких температурах в направлении [001] оказалась больше на 50%, чем в направлении [111]. Для кристаллов CaF₂ наоборот – в направлении [001] теплопроводность оказалась ниже на 40%, чем в направлении [111]. Вторым эффектом является зависимость величин теплопроводности от ориентации боковых граней образца с прямоугольным поперечным сечением. Для двух исследованных в [17] образцов, имеющих одинаковые геометрические параметры и направление градиента температуры [110], оказалось, что при низких температурах теплопроводность образца с широкой гранью {001} и узкой {110} оказалась на 33% выше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {001}. Поэтому представляет интерес исследовать анизотропию теплопроводности в более широком интервале изменений соотношения сторон прямоугольного сечения и сравнить их с зависимостями для образцов с квадратным сечением. При температурах выше максимума $\kappa(T)$, когда длина свободного пробега фононов становится меньше поперечных размеров образца, теплопроводность кубических кристаллов становится изотропной – она не зависит от направления в кристалле.

В работе [17] теория Казимира [14] была обобщена на случай упруго анизотропных кристаллов. Предполагалось, что поток тепла и распределение температур однородны по длине образца, а также наличие плоскости зеркальной симметрии перпендикулярной оси образца. В этих предположениях рассчитаны длины свободного пробега фононов в симметричных направлениях для кристаллов Si и CaF₂ при температуре 3 К. Рассчитанные значения средних длин свободного пробега фононов согласуются с экспериментальными данными при $T = 3$ К с погрешностью, не превышающей 8%.

Однако авторам [17] не удалось получить аналитических выражений для времен релаксации фононов при диффузном рассеянии фононов на границах образцов конечной длины и исследовать влияние фокусировки фононов на температурные зависимости теплопроводности. Поэтому одной из задач настоящей диссертации является аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с учетом фокусировки фононов и определение времен релаксации фононов.

В значительном числе публикаций [4–10, 21, 22], посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах использовалась, как правило, модель изотропной среды, а эффекты, связанные с фокусировкой фононов, не учитывались. Также не рассматривалось влияние геометрических параметров пленок на теплопроводность. Так, например, в работе [22] показано, что длины свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины (длины Казимира) при диффузном рассеянии на границах логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Вопрос о влиянии конечной длины пленки на расходимость длин Казимира не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости теплопроводности от геометрических параметров пленок, от направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристалла. Решение этих проблем позволило бы определить оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов микросхем. Эти проблемы являются актуальными не только для кремниевых пленок, широко используемых в микроэлектронике, но и других полупроводниковых микроструктур [4–10, 19, 23]. Поэтому они являются предметом изучения настоящей диссертации. С другой стороны в работах [5, 9, 10, 21, 22] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась модель изотропной среды и теория Казимира [14]. Поэтому при изложении экспериментальных результатов в обзорах [4, 6–10] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Нами показано в [24], что при учете фокусировки изменение ориентации плоскости пленки может приводить к изменению значений теплопроводности в 2–3 раза. Поэтому отсутствие такой информации делает эти данные малоинформативными. Следует отметить, что ориентационные зависимости теплопроводности определяются типом анизотропии упругой энергии и качественно отличаются для кубических кристаллов различного типа [24].

В работе [25] показано, что влияние анизотропии упругой энергии на спектр и вектора поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром

$$k - 1 = \frac{c_{12} + 2c_{44} - c_{11}}{c_{11} - c_{44}},$$

где c_{ij} – упругие модули второго порядка. В зависимости от знака параметра $k - 1$ все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $k - 1 > 0$ и отрицательной $k - 1 < 0$ анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов первого ($k - 1 > 0$) и второго типа ($k - 1 < 0$) качественно отличается (см. подробнее [25]). Проведенный нами анализ в работе [24] показал, что направления фокусировки фононов для каждой из акустических мод в кристаллах одного

типа совпадают, тогда как для кристаллов разного типа они отличаются. Это приведет к качественному отличию анизотропии теплопроводности в кристаллах разного типа. В связи с этим исследованию особенностей фононного транспорта в монокристаллических пленках и нанопроводах кубической симметрии с различным типом анизотропии упругой энергии будет уделено большое внимание.

Следует отметить, использование численных методов таких, как метод молекулярной динамики не дает пока достаточно надежных результатов при расчете температурных зависимостей теплопроводности с учетом фокусировки фононов. Расчет теплопроводности алмазных нанопроводов в [23,26] в симметричных направлениях привел к взаимно противоположным результатам для анизотропии теплопроводности. Теоретический анализ в работе [26] показал, что теплопроводность алмазных нанопроводов в направлениях [110] значительно больше, чем в направлениях [001] и [111]. Этот результат противоречит экспериментальным данным МакКарди и др. [17] и нашему анализу. Согласно [27–30] максимумы теплопроводности для кристаллов Ge, Si и алмаза в низкотемпературной области должны наблюдаться в направлениях типа [001]. Они обусловлены медленной поперечной модой, которая фокусируется именно в этом направлении. Результаты [23] для анизотропии теплопроводности качественно согласуются с нашими оценками и результатами [17]. Однако, согласно расчетам [23], значительная анизотропия теплопроводности имеет место при температурах, значительно превышающих температуру максимума теплопроводности. Это противоречит результатам [17], из которых следует, что при повышении температуры выше максимума теплопроводности и переходе к объемным механизмам релаксации, анизотропия теплопроводности быстро исчезает.

Цель работы.

Исследовать роль граничного рассеяния фононов в теплопроводности кубических кристаллов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями при учете эффектов, обусловленных фокусировкой фононов. Объяснить экспериментальные данные по анизотропии и температурным зависимостям коэффициентов теплопроводности объемных кристаллов кремния, а также кремниевых пленок и нанопроводов.

Выполнение поставленных целей требует решения следующих *задач*:

1. Найти аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа при диффузном рассеянии фононов на границах образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями с учетом фокусировки фононов и определить времена релаксации фононов.
2. Разработать метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов. Показать, что использование этого метода и вычисленных времен релаксации фононов на границах образца позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности объемных образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур.

3. Рассмотреть особенности фононного транспорта в монокристаллических тонких пленках и нанопроводах кубической симметрии с различным типом анизотропии упругой энергии.
4. Используя предложенный метод и рассчитанные нами времена релаксации фононов на границах, описать экспериментальные данные по теплопроводности кремниевых нанопроводов с диаметрами большими 50 нм и кремниевых пленок с толщинами большими 20 нм от низких до комнатных температур. Оценить роль граничного рассеяния фононов в теплопроводности этих образцов при комнатной температуре.

Научная новизна диссертации.

Впервые дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями.

Это позволило определить времена релаксации фононов различных поляризации при диффузном рассеянии фононов на границах образца. Сформулирован метод, позволяющий учитывать эффекты, обусловленные фокусировкой фононов при расчете теплопроводности кубических кристаллов. Определены оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем при низких температурах.

Положения, выносимые на защиту:

1. Дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Установлено, что в образцах с квадратным и круглым сечениями длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод.
2. Предложен метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов. Использование этого метода позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности объемных образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур.
3. Показано, что анизотропия теплопроводности в нанопроводах определяется фокусировкой и дефокусировкой фононов, тогда как для тонких пленок она в значительной степени определяется ориентацией плоскостей пленки, имеющих различную симметрию. Причем, при диффузном рассеянии фононов на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью - пленки с ориентацией $\{111\}$.
4. Установлено, что использование предложенного метода и рассчитанных нами времен релаксации фононов на границах позволяет в трехмодовой модели Каллавея адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с диамет-

рами большими 50 нм и кремниевых пленок с толщинами большими 20 нм от низких до комнатных температур.

5. Показано, что при комнатных температурах существенную роль в теплосоппротивлении наноразмерного образца играет рассеяние фононов на границах: его вклад достигает 60% для кремниевого нанопровода с диаметром 56 нм и 58% для кремниевой пленки с толщиной 20 нм.

Научная и практическая значимость работы.

1. Развитый метод учета фокусировки фононов и полученные выражения для времен релаксации фононов на границах образца могут найти применение при исследовании влияния фокусировки фононов на теплопроводность в объемных кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии и наноструктурах на их основе.
2. Показано, что в нанопроводах с квадратным и круглым сечениями длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод. Этот результат имеет значение для теории конденсированного состояния.
3. Метод аппроксимации фононного спектра фононов на всю зону Бриллюэна может быть использован при вычислении кинетических и термодинамических характеристик в объемных полупроводниковых кристаллах и наноструктур кубической симметрии.
4. Установлено, что при диффузном рассеянии фононов на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью - пленки с ориентацией $\{111\}$. Поэтому для получения максимального теплоотода от элементов полупроводниковых микросхем необходимо использовать кремниевые пленки плоскостью $\{100\}$, а для минимального – с плоскостью $\{111\}$.

Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации работы кремниевых микросхем, а также при создании новых полупроводниковых устройств.

Методология и методы исследования.

Теоретический анализ фононного транспорта в кубических кристаллах основан на методе кинетического уравнения Больцмана (КУБ) для функции распределения фононов. Он позволяет рассмотреть влияние различных механизмов релаксации фононов на теплопроводность, а также учесть особую роль нормальных процессов (N-процессов) фонон-фононного рассеяния. Температурные зависимости теплопроводности объёмных кристаллов кремния, как и кремниевых пленок и нанопроводов, анализируются в трехмодовой модели Каллавея [31–34] в рамках стандартного релаксационного метода [1, 35, 36]. В этой модели выделяются вклады резистивных и нормальных процессов релаксации фононов в полную скорость релаксации. Резистивные процессы рассеяния фононов — процессы рассеяния, приводящие к релаксации импульса фононной системы. К ним относятся рассеяние фононов на фононах в процессах переброса, на дефектах

(изотопическом беспорядке) и границах образца. В нормальных процессах релаксации импульс фононной системы сохраняется. Эти процессы перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение. В качестве нормальных процессов релаксации учитываются ангармонические механизмы Херринга [37] для продольных фононов и Ландау-Румера [38] для поперечных фононов. Поэтому решеточную теплопроводность в трехмодовой модели Каллавея можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного и дрейфового вкладов. В отличие от ранее опубликованных работ [1, 31–36], при анализе фононного транспорта мы учли фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности от ориентации теплового потока. Метод Каллавея хорошо апробирован и широко используется при анализе теплопроводящих свойств как объемных, так и наноразмерных материалов.

Для описания рассеяния фононов на границах и фононного транспорта в пленках и нанопроводах будет использоваться метод Казимира – МакКарди [14, 17]. Этот метод был развит Казимиром [14], который в модели изотропной среды рассмотрел задачу о теплопроводности диэлектрического стержня бесконечной длины при диффузном рассеянии фононов на границах образца. В дальнейшем эта теория была обобщена в работе МакКарди [17] на случай упруго анизотропных кристаллов. Адекватным приближением для исследования релаксационных характеристик фононной системы является модель анизотропного континуума [39]. В этой модели гармоническая энергия кубических кристаллов выражается через три модуля упругости второго порядка, а ангармоническая энергия - через шесть модулей упругости третьего порядка. Причем, для значительной части кубических кристаллов упругие модули второго и третьего порядка экспериментально определены. Поэтому расчет релаксационных характеристик в этой модели, является надежной основой для интерпретации экспериментальных данных по фононному транспорту в кубических кристаллах.

При анализе влияния дисперсии фононов на теплопроводность объемных и наноразмерных материалов используется разработанный нами в [27, 40] метод аппроксимации фононного спектра кубических кристаллов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна. Данный метод применен к исследованию влияния эффекта фононной фокусировки на фононный транспорт в пленках и нанопроводах на основе кремния.

Достоверность.

Достоверность представленных результатов обеспечивается применением проверенных и широко апробированных методов расчета спектра фононов и решеточной теплопроводности кубических кристаллов, обоснованным выбором приближений и согласием полученных физических характеристик с теоретическими и экспериментальными литературными данными. Численные расчеты теплопроводности и длин свободного пробега фононов в объемных и наноразмерных образцах проводились независимо автором и к.ф.-м.н. И. И. Кулеевым.

Личный вклад автора.

Вошедшие в диссертацию результаты получены автором под научным руководством д.ф.-м.н. Кулеева Игоря Гайнитдиновича.

Автор совместно с научным руководителем участвовал в обсуждении постановки цели и задач исследования. Бахаревым С.М. лично были проведены аналитические расчеты теплопроводности и длин свободного пробега фононов в кубических кристаллах конечной длины с учетом фокусировки фононов. Автором лично разработаны программы для вычисления длин свободного пробега фононов и теплопроводности с учетом дрейфового движения фононов в кубических кристаллах. Обсуждение результатов исследований осуществлялось автором вместе с руководителем и соавторами Кулеевым И.И., Инюшкиным А. В. и Устиновым В. В.

Апробация результатов.

Результаты, вошедшие в представляемую диссертационную работу, изложены в 20 публикациях, включающих 10 статей в реферируемых журналах из списка ВАК и 10 тезисов докладов на различных научных мероприятиях. Список публикаций приведен в конце диссертации на стр. 141.

Основные результаты диссертационного исследования были представлены на Всероссийской школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-12 – СПФКС-15, Екатеринбург, Россия, 2011-2014 гг.); Международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка» (Новоуральск, Россия, 2012 г.); Совещании по физике низких температур (Санкт-Петербург, Россия, 2012 г., Казань, Россия, 2015 г.); Международной научной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела» (Минск, Белоруссия, 2013 г.); на научной сессии Института физики металлов УрО РАН (Екатеринбург, Россия, 2014 г.); конференции молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (Сочи, Россия, 2014 г.); на лабораторных семинарах Института Физики Металлов УрО РАН (Екатеринбург, Россия).

Соответствие диссертации паспорту специальности.

Содержание диссертации соответствует пункту 1. «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, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» паспорта специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и приложения.

В первой главе представлены результаты анализа анизотропии спектра и векторов поляризации фононов в модели анизотропной среды для кристаллов с различным типом анизотропии упругой энергии. Предложен метод аппроксимации фононного спектра кубических кристаллов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна. Расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge показал, что предложенная аппроксимация спектра удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными и может быть использована при анализе релаксационных характеристик фононных систем. Исследованы особенности фокусировки фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Рассмотрено влияние фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний.

Во второй главе дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. В модели

анизотропного континуума рассчитаны длины пробега фононов различных поляризаций. Показано, что анизотропия длин пробега фононов заметно уменьшается при переходе от образцов бесконечной длины к образцам конечной длины. Проанализирована анизотропия длин свободного пробега фононов для каждой из ветвей фононного спектра в кристаллах кремния при низких температурах. Установлено, что в образцах с квадратным и круглым сечениями длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод.

В третьей главе предложен метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов. Основываясь на аналитическом решении задачи о граничном рассеянии фононов (см. главу 2) и учитывая эффекты, экспериментально обнаруженные в работе [17], мы ввели два ориентационных параметра, которые учитывают зависимость теплопроводности от направления теплового потока и ориентации боковых граней образца. Показано, что ориентационные параметры могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Использование предложенного метода и вычисленных нами времен релаксации фононов позволило адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями и объяснить оба эффекта в теплопроводности, обнаруженных в работе МакКарди [17]. Определены параметры ангармонического рассеяния фононов. Рассмотрен переход от доминирующей роли граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации фононов при повышении температуры.

В четвертой главе представлены результаты исследования влияния фокусировки фононов на фононный транспорт в монокристаллических наноразмерных материалах с различным типом анизотропии упругой энергии в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Показано, что анизотропия теплопроводности для наноструктур из кубических кристаллов с положительной (GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) и отрицательной (CaF₂, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка качественно отличается, как для тонких пленок, так и для нанопроводов. В монокристаллических нанопроводах из кристаллов первого типа направления фокусировки фононов соответствуют направлениям дефокусировки для нанопроводов из кристаллов второго типа. Поэтому длины пробега фононов в монокристаллических нанопроводах из кристаллов первого типа достигают максимальных значений в тех направлениях, в которых они имеют минимальные значения для кристаллов второго типа и наоборот. В монокристаллических пленках первого типа максимальные значения теплопроводности достигаются для ориентации {100}, а минимальные значения – для пленок с ориентацией {111}. В монокристаллических пленках второго типа минимальные значения теплопроводности достигаются для ориентации {100}, а максимальные – для ориентации плоскости пленки {110} и направления теплового потока [110].

В пятой главе исследовано влияние фокусировки фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов и тонких пленок в рамках трехмодовой модели Каллавея. Использование предложенного метода и вычисленных нами времен релаксации фононов позволило согласовать результаты расчета температурных зависимостей

теплопроводности кремниевых нанопроводов диаметром более 50 нм и пленок толщиной более 20 нм с экспериментальными данными. Определены ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем как при низких, так и при комнатных температурах. Показано, что при диффузном отражении фононов от границ наименьшей рассеивающей способностью (и максимальной теплопроводностью) обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$, а максимальной рассеивающей способностью (и минимальной теплопроводностью) – плоскость с ориентацией $\{111\}$. В достаточно широких пленках величины теплопроводности в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки, тогда как для нанопроводов с квадратным сечением зависят, главным образом, от направления теплового потока. Проанализировано влияние анизотропии упругой энергии на зависимости теплопроводности от геометрических параметров пленок. Определены температуры перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации.

В заключении диссертации приведены основные результаты и выводы работы.

В приложении А приведено решение системы кинетических уравнений для неравновесных функций распределений фононов с учетом нормальных процессов фонон-фононного рассеяния.

Работа выполнена при поддержке программы ОФН РАН (гранты №12-Т-2-1018, №09-Т-2-1005), гранта ведущей научной школы (НШ-14.120.14.1540, НШ-6172.2012.2) и фонда «Династия».

Глава 1

Распространение упругих волн и фокусировка в кубических кристаллах

В значительном числе публикаций, посвященных анализу теплопроводности, как в объёмных материалах [1, 14, 35, 36], так и наноструктурах [4, 7, 8, 22, 41], для спектра и векторов поляризаций фононов использовалась модель изотропной среды. В изотропных средах распространяются чисто продольные и чисто поперечные колебательные моды, причем, последние являются вырожденными. Очевидно, что эта модель не является адекватной для анализа фононного транспорта и поглощения ультразвука в кристаллических твердых телах (см., например [17, 40]). В этом случае необходимо учитывать анизотропию упругой энергии. В длинноволновом приближении, когда волновой вектор фонона гораздо меньше Дебаевского волнового вектора, адекватным приближением является модель анизотропного континуума. В этой модели упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями упругости второго порядка, которые для большинства исследованных кристаллов экспериментально определены [42–51].

Учет упругой анизотропии кубических кристаллов приводит к ряду новых эффектов для динамических характеристик упругих волн. Во-первых, в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания, и только в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды [39, 44]. Во-вторых, спектр фононов становится анизотропным, и снимается вырождение поперечных колебательных мод. Следует отметить, что анизотропия спектра и наличие точек вырождения для поперечных мод в кубических кристаллах приводит к появлению новых механизмов релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния в отличие от изотропных сред [37, 52, 53]. Детальный анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах проведен в работе [25] (см. также раздел 1.1). В ней показано, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах мал, и им можно пренебречь. Напротив, вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым, и при расчете релаксационных характеристик фононных систем необходимо учитывать продольную компоненту этих мод. Показано, что кубические кристаллы в соответствии с их упругими свойствами могут быть разделены на кристаллы с положительной (тип I) и отрицательной (тип II) анизотропией упругих модулей второго порядка [25]. Вид спектра колебательных ветвей для кристаллов этих типов различает-

ся качественно, тогда как внутри одного типа кристаллов спектры фононов различаются лишь количественно.

В-третьих, анизотропия упругих свойств кубических кристаллов приводит к неколлинеарности групповой и фазовой скоростей фононов и, соответственно, к фокусировке или дефокусировке колебательных мод [54, 55]. Фононы будут преимущественно распространяться в направлениях фокусировки, а в направлениях близких к направлениям дефокусировки плотность состояний колебательных мод может быть значительно меньше, чем в модели изотропной среды. Нами показано, что в кристаллах первого и второго типа не только анизотропия спектра и векторов поляризации качественно различны, но и отличаются направления фокусировки и дефокусировки всех колебательных мод. При низких температурах, когда длина пробега фононов превышает поперечный размер образца, это может приводить к существенному влиянию на фононный транспорт в кубических кристаллах.

Для анализа температурных зависимостей теплопроводности модель анизотропного континуума является недостаточной, поскольку нам необходимо знать спектр фононов во всей зоне Бриллюэна. Поэтому в разделе 1.2 спектр фононов для кристаллов Si, найденный из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, аппроксимирован на всю зону Бриллюэна. В разделе 1.3 найденный спектр фононов применен к расчету теплоемкости кристаллов Si и Ge.

В разделе 1.4 проанализированы угловые зависимости групповой скорости и фокусировка фононов в кубических кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии. Рассмотрено изменение направлений фокусировки колебательных мод при переходе от длинноволновых фононов к коротковолновым. В разделе 1.5 исследовано влияние фокусировки на угловое распределение плотности фононных состояний в кубических кристаллах.

1.1 Модель анизотропного континуума. Спектр и вектора поляризации фононов

Рассмотрим модель анизотропного континуума [25, 39]. В этой модели упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями второго порядка c_{11} , c_{12} и c_{44} . Она справедлива для волновых векторов фононов \mathbf{q} гораздо меньших дебаевского волнового вектора \mathbf{q}_D . В рамках этой модели спектр фононов ω_q^λ с поляризацией λ может быть представлен в виде:

$$\omega_q^\lambda = S_0^\lambda(\theta, \varphi)q. \quad (1.1)$$

Анизотропия спектра определяется фазовой скоростью фонона $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$, зависящей от угловых переменных θ и φ вектора \mathbf{q} (угол θ задает отклонение вектора \mathbf{q} от оси Z , φ – угол между осью X и проекцией вектора \mathbf{q} на плоскость XY). Для кубических кристаллов компоненты векторов поляризаций e_j (\mathbf{e} – единичный вектор, который задает направление смещения среды) и спектр фононов в системе координат по ребрам куба могут быть определены из системы уравнений

Кристоффеля [44], которая в обозначениях Саймонса [56] может быть представлена в виде:

$$\sum_j e_j \{ (n_i n_j - \varepsilon \delta_{ij}) + (k - 1) n_i n_j (1 - \delta_{ij}) \} = 0. \quad (1.2)$$

Здесь $n_j = q_j/q$ – проекции единичного вектора фонона $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ на соответствующие оси координат, δ_{ij} – символ Кронекера ($\delta_{ij} = 1$, если $i = j$, и $\delta_{ij} = 0$, если $i \neq j$),

$$k = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}},$$

$$\varepsilon = \frac{S_0^\lambda(\theta, \varphi)^2 \rho - c_{44}}{c_{11} - c_{44}},$$

где ρ – плотность кристалла. Из условия существования нетривиального решения системы уравнений (1.2) находим:

$$\varepsilon^3 - \varepsilon^2 - (k^2 - 1)\varepsilon\xi - (1 - k)^2(2k + 1)\eta = 0, \quad (1.3)$$

где $\xi = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$ и $\eta = n_1^2 n_2^2 n_3^2$ – кубические гармоники. Решение этого уравнения относительно ε дает три значения скорости, при которых система уравнений (1.2) совместна. Поскольку для любого направления имеется три решения, т.е. три скорости, то ясно, что существует лишь три индивидуальные бегущие моды: продольная (L) и две поперечных (t_1, t_2). Из (1.3) находим фазовую скорость для акустических ветвей фононного спектра [25]:

$$S_0^\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^\lambda}, \quad \varepsilon^\lambda = \frac{1}{3} + Z^\lambda. \quad (1.4)$$

Величины Z^λ для продольных (L) и поперечных фононов (t_1, t_2) определяются выражениями:

$$Z^L = \frac{2}{3} r \cos \frac{Q}{3}, \quad Z^{t_1, t_2} = \frac{2}{3} r \cos \left(\frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3} \right), \quad (1.5)$$

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

Решения кубического уравнения (1.3) ε_{t_1} и ε_{t_2} , определяемые формулами (1.4) и (1.5), соответствуют «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам. Далее будет показано, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев не является физически корректным.

Для изотропной среды параметр $k - 1 = 0$, и анизотропия спектра исчезает, а уравнение (1.3) сводится к виду

$$\varepsilon^2(\varepsilon - 1) = 0.$$

Одно из его решений дает фазовую скорость продольных фононов $S^L = \sqrt{c_{11}/\rho}$. Два других решения совпадают и дают фазовые скорости поперечных фононов $S^{t_1} = S^{t_2} = \sqrt{c_{44}/\rho}$. А для векторов поляризации имеем $\mathbf{e}^L = \mathbf{n}$ и $(\mathbf{e}^t \mathbf{n}) = 0$. Таким образом, в изотропной среде могут распространяться чисто продольные и чисто поперечные волны с фиксированными скоростями

ми, которые определяются двумя модулями упругости второго порядка c_{11} и c_{44} и плотностью кристалла ρ .

В отличие от изотропных сред в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания. Подстановка решений (1.4) и (1.5) в систему уравнений (1.2) позволяет определить вектора поляризаций фононов различных колебательных ветвей [25]:

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A^\lambda} \cdot \frac{n_j}{\psi_j^\lambda}, \quad A^\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}}, \quad (\mathbf{e}^\lambda \mathbf{n}) = \frac{1}{A^\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda}, \quad \psi_j^\lambda = \varepsilon^\lambda + (k-1)n_j^2. \quad (1.6)$$

Нетрудно убедиться, что для векторов поляризаций выполняются соотношения:

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

Для каждого направления волнового вектора в кристалле существуют три независимые волны со своими скоростями $S^\lambda(\theta, \varphi)$ и взаимно перпендикулярными смещениями. В общем случае ни одно из этих смещений не совпадает ни с нормалью к фронту волны, ни с перпендикулярным направлением к нормали: т.е. волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными [44]. Однако в симметричных направлениях, таких как [100], [110] и [111], распространяются чистые моды, причем в направлениях типа [100] и [111] поперечные моды вырождены (см. рис. 1.1). Для направления [111] угол $\varphi = \pi/4$, а угол $\theta = \theta_{[111]} = \arctan \sqrt{2} \approx 54.7^\circ$. Для упругоизотропных сред параметр k равен единице, и поперечные моды вырождены для всех направлений. Как видно из рисунков 1.1, для кубических кристаллов скорости звука и, соответственно, спектры фононов существенно отличаются от изотропных сред. Следует отметить, что анизотропия спектра и наличие точек вырождения в колебательных модах поперечных фононов приводит к существенным отличиям частот релаксации фононов в ангармонических процессах рассеяния в кубических кристаллах от изотропных сред [56, 57].

Из уравнений Кристофеля (1.2) и (1.3) следует, что влияние анизотропии упругой энергии на спектр и вектора поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром $k-1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11})/(c_{11} - c_{44})$. В работе [25] показано, что в зависимости от знака параметра $k-1$ все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $k-1 > 0$ и отрицательной $k-1 < 0$ анизотропией упругих модулей второго порядка (см. таблицу 1.1). Для изотропных сред параметр $k = 1$. К первому типу относятся кристаллы LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG (иттрий-алюминиевый гранат) и т.д. (см. таблицу 1.1). Для них в направлении [100] скорость продольных фононов – минимальна, а поперечных фононов – максимальна, тогда как в направлении [111] скорость продольных фононов – максимальна, а для поперечных фононов – минимальна в направлении [110] (см. рис. 1.1a, в):

$$S_{[100]}^L = \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}, \quad S_{[111]}^L = S_{[100]}^L \sqrt{1 + \frac{2\Delta C}{3c_{11}}}, \quad S_{[110]}^L = S_{[100]}^L \sqrt{1 + \frac{\Delta C}{2c_{11}}},$$

$$S_{[100]}^t = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}, \quad S_{[111]}^t = S_{[100]}^t \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{3c_{44}}}, \quad S_{[110]}^{t_1} = S_{[100]}^t, \quad S_{[110]}^{t_2} = S_{[100]}^t \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}}}, \quad (1.7)$$

где параметр $\Delta C = c_{12} + 2c_{44} - c_{11}$.

Ко второму типу кубических кристаллов ($k - 1 < 0$) относятся кристаллы CaF_2 , KCl , NaCl , YIG (иттрий-железистый гранат) и т.д. (см. таблицу 1.1). Как видно из сравнения рисунков 1.1(а,б) и 1.1(в,г), вид спектров колебательных ветвей для кристаллов первого и второго типа качественно отличается тогда, как внутри одного типа кристаллов спектры фононов отличаются лишь количественно. Для этих кристаллов, в противоположность кристаллам первого типа, скорость продольных фононов максимальна в направлении типа $[100]$ и минимальна в направлении $[111]$, скорость поперечных фононов максимальна в направлении $[110]$ и минимальна в направлении $[100]$ (см. рис. 1.1(б,г)). Хотя Ge , Si и алмаз, входящие в первую группу кубических кристаллов, являются ковалентными, а KCl , NaCl и CaF_2 являются ионными кристаллами, проведенное разделение кубических кристаллов по их упругим свойствам на два типа не связано с характером их химической связи. Следует отметить, что в первую группу попали ионные соединения LiF и MgO . Отметим, что металлы кубической симметрии также попали и в первую, и во вторую группу.

Что касается векторов поляризации фононов, то для произвольного направления (не совпадающего ни с одним из симметричных направлений) в кубических кристаллах распространяются квазипродольные или квазипоперечные колебания. При этом вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах и первого, и второго типа мал, и им можно пренебречь. Оценки показывают (см. рис 1.2, кривые 1' и 2'), что величина $(\mathbf{e}^L \mathbf{n}) = 1 - \delta^L$ мало отличается от единицы, при этом параметр $\delta^L < 0.02$ ($\delta^L = 1 - (\mathbf{e}^L \mathbf{n})$) для кристаллов типа Ge , Si , алмаза, GaSb и $\delta^L < 0.03$ для кристаллов типа KCl . Ситуация с векторами поляризации квазипоперечных колебаний в общем случае более сложная, и продольная составляющая для квазипоперечных мод может быть значительной. Детальный анализ поведения векторов поляризации в кубических кристаллах различного типа выполнен в работе [25]. Ниже, при изложении этого вопроса мы будем следовать этой работе.

Рассмотрим угловые зависимости векторов поляризации для двух наиболее актуальных случаев, а именно: (1) для волновых векторов, лежащих в плоскостях граней куба, (2) для волновых векторов, лежащих в диагональных плоскостях. Для волнового вектора фонона, расположенного в плоскости XZ , вектор $\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, функции $\xi = n_1^2 n_2^2 = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, $\eta = 0$, а кубическое уравнение (1.3) сводится к виду:

$$\varepsilon(\varepsilon^2 - \varepsilon - (k^2 - 1)\xi) = 0. \quad (1.8)$$

Его решение для продольных и поперечных мод имеет вид:

$$\varepsilon^{t_1} = 0, \quad \varepsilon^{L,t_2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + (k^2 - 1)\xi}, \quad S^{t_1} = S_{[100]}^t, \quad S^{L,t_2} = S_{[100]}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^{L,t_2}}. \quad (1.9)$$

Подстановка этих решений в (1.2) (или использование формул (1.2)) дает выражения для векторов поляризации:

$$\mathbf{e}^{t_1} = (0, 1, 0), \quad (\mathbf{e}^{t_1} \mathbf{n}) = 0, \quad e_x^{t_2} = \frac{n_x \psi_z \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2}, \quad e_y^{t_2} = 0, \quad \psi_{x,z} = \varepsilon^{t_2} + (k - 1)n_{x,z}^2,$$

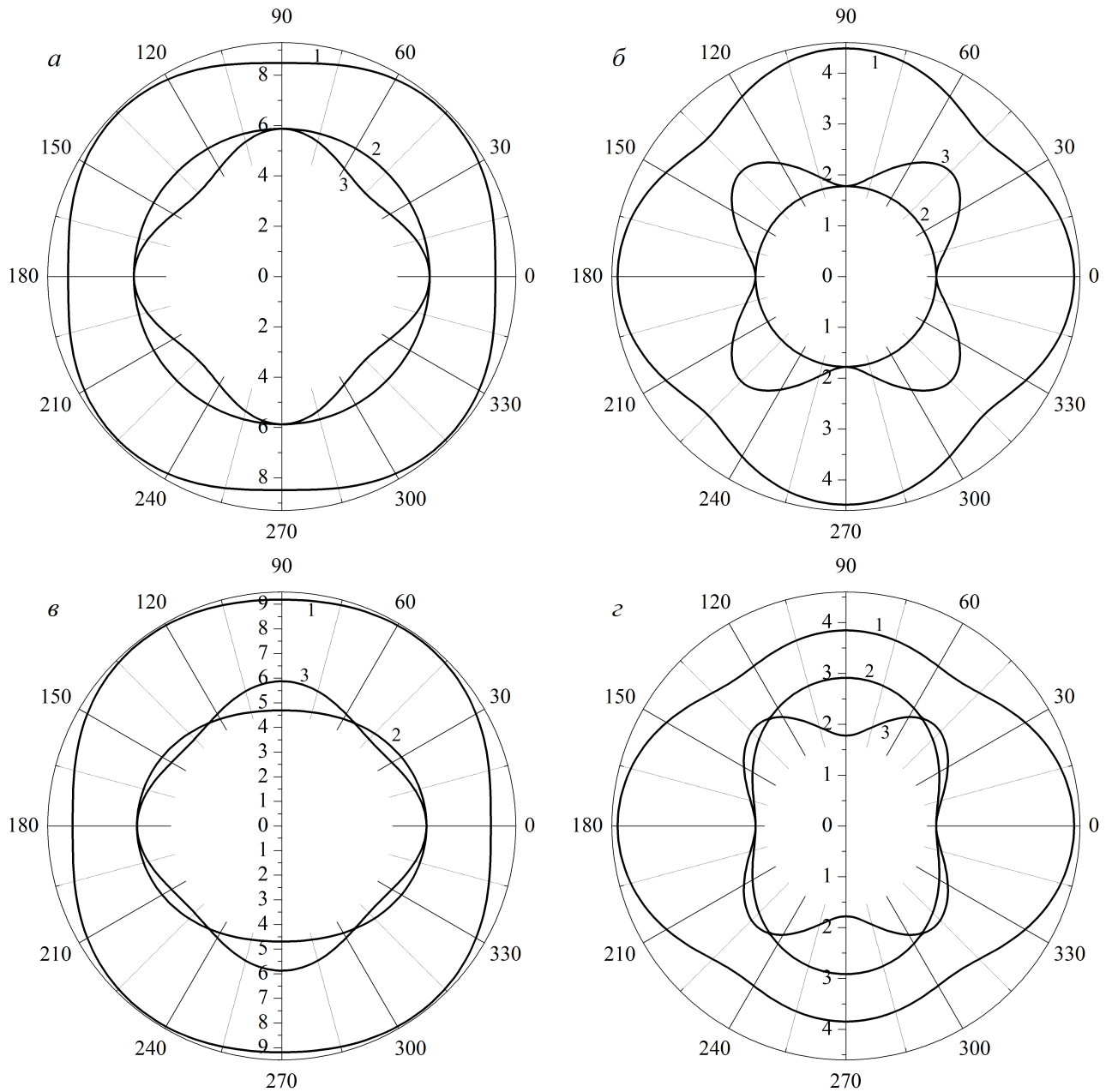


Рисунок 1.1. Угловые зависимости скоростей звука $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ (10^5 см/с), в кристаллах Si (*a*, *в*) и KCl (*б*, *г*) для волнового вектора, лежащего в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (*a*, *б*) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) (*в*, *г*). Кривые 1 – для квазипродольных волн, кривые 2 и 3 – для квазипоперечных мод.

Таблица 1.1. Упругие модули второго порядка c_{ij} (10^{12} дин/см²), плотность ρ (г/см³) и параметр анизотропии $k - 1$ для ряда кубических кристаллов.

Тип	Кристалл	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ρ	$k-1$
I	GaAs [50]	1.1904	0.5384	0.5952	5.317	0.90
	Ge [44]	1.289	0.483	0.671	5.32	0.87
	InSb [44]	0.672	0.367	0.302	5.76	0.81
	LiF [51]	1.246	0.424	0.649	2.646	0.78
	Ag [44]	1.22	0.915	0.448	10.49	0.766
	MgO [44]	2.86	0.87	1.48	3.58	0.703
	Si [47]	1.677	0.65	0.804	2.3301	0.67
	Pb [44]	0.466	0.392	0.144	11.34	0.655
	Ni [44]	2.465	0.473	1.247	8.9	0.412
	Алмаз [46]	10.76	1.25	5.76	3.512	0.40
	Au [44]	1.86	1.57	0.42	19.32	0.382
	Al [44]	1.069	0.626	0.285	2.7	0.162
	YAG [43]	3.281	1.064	1.137	4.55	0.03
II	KCl [49]	0.398	0.062	0.0625	1.98	-0.63
	NaCl [45]	0.575	0.099	0.133	2.214	-0.48
	PbS [44]	1.27	0.298	0.248	7.5	-0.466
	CaF ₂ [48]	1.74	0.56	0.359	3.211	-0.33
	Mo [44]	4.6	1.76	1.1	10.19	-0.183
	YIG [43]	2.69	1.077	0.764	5.17	-0.04

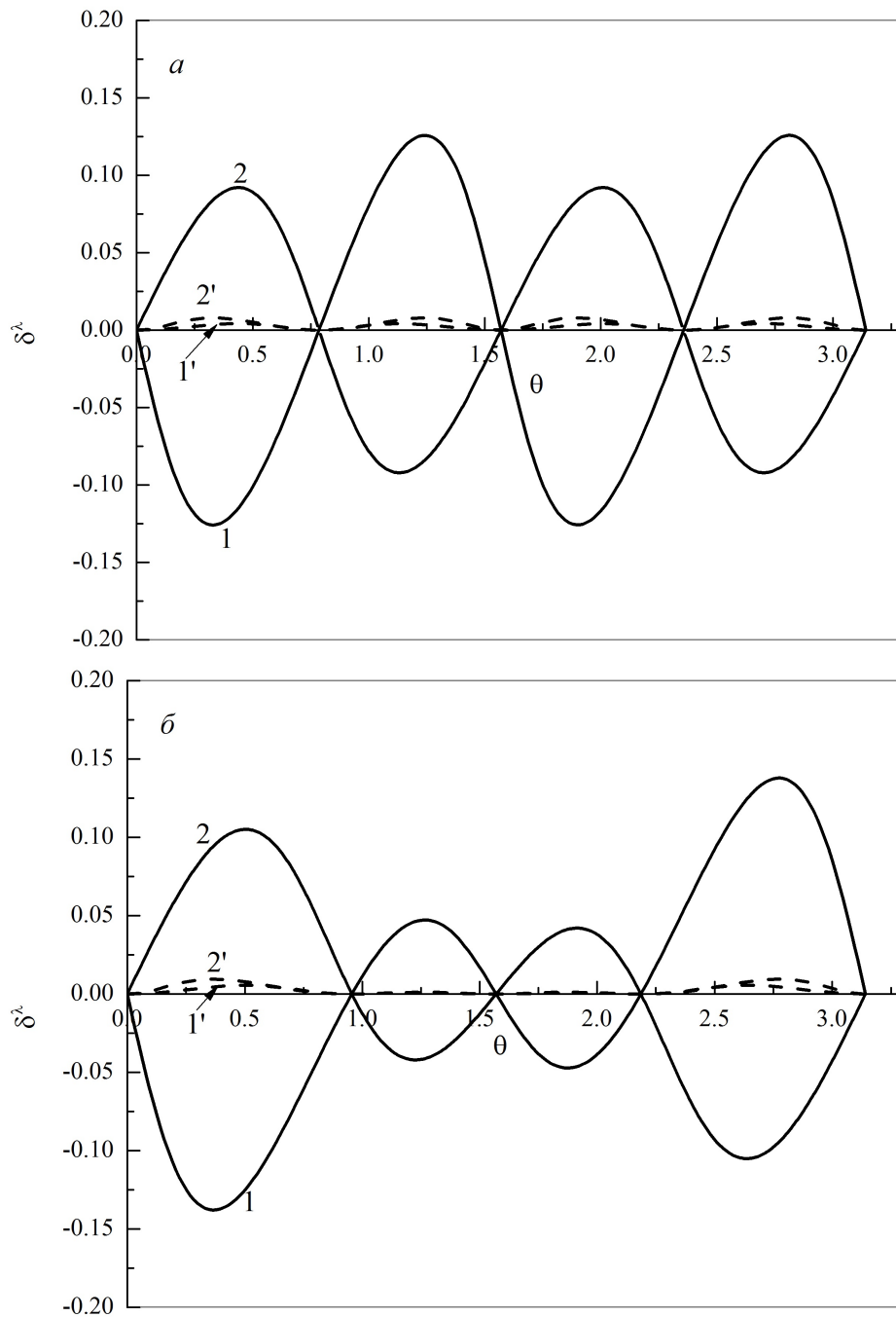


Рисунок 1.2. Угловые зависимости величин δ^L и δ^{t_2} , характеризующих отклонения векторов поляризации от чистых мод, для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Кривые 1, 1' - для кристаллов Si, 2, 2' - для NaCl. Кривые 1,2 - для квазипоперечных мод и 1', 2' - для квазипродольных мод.

$$e_z^{t_2} = \frac{n_z \psi_x \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} = -\sqrt{1 - (e_x^{t_2})^2}, \quad \psi_2 = \sqrt{\varepsilon^{t_2}(1 + 4(k-1)\xi) + 2k(k-1)\xi}, \quad (1.10)$$

$$\delta^{t_2} = (\mathbf{e}^{t_2} \mathbf{n}) = \frac{\text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} (\varepsilon^{t_2} + 2(k-1)\xi) = \cos(\theta_e - \theta).$$

где θ_e – угол между вектором поляризации \mathbf{e}^{t_2} и осью Z . Итак, мода ε^{t_1} является чисто поперечной с вектором поляризации, направленным вдоль оси Y . Она является быстрой для кубических кристаллов с положительной анизотропией второго порядка ($k - 1 > 0$) и медленной для кристаллов с отрицательной анизотропией ($k - 1 < 0$). Мода ε^{t_2} в общем случае является смешанной поперечно-продольной модой. Для нее вектор поляризации лежит в плоскости XZ . Причем в кристаллах I типа (Ge, Si) она соответствует медленной моде, а в кубических кристаллах II типа (KCl, NaCl) она является быстрой поперечной модой (см. рис. 1.1). Величина δ^{t_2} характеризует отклонение вектора поляризации \mathbf{e}^{t_2} от чистой моды. Максимальные значения продольных компонент этой моды δ^{t_2} составляют 15.5% для кристаллов Ge и достигают 24% для KCl. Абсолютные значения величины $k - 1$, которые характеризуют анизотропию упругих свойств кубических кристаллов, убывают при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si, алмаза, поэтому максимальные значения δ^{t_2} уменьшаются до 12.6% для кристаллов Si, 8.4% для алмаза и 9.1% для NaCl (см. рис. 1.2).

Из рисунка 1.3а видно, что значения x -компонент векторов поляризации $\mathbf{e}_0^{t_2}$ квазипоперечных мод в кристаллах Si и NaCl (кривые 1 и 2) значительно отличаются от соответствующих им компонент чистой моды $\mathbf{e}_0^{t_2} = (\cos \theta, 0, -\sin \theta)$, для которой величина $(\mathbf{e}_0^{t_2} \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов. Как видно из рисунков 1.2 и 1.3, для кристаллов типа (Ge, Si) в области углов $0 < \theta < \pi/4$ угол θ_e между волновым вектором и вектором поляризации \mathbf{e}^{t_2} превосходит значение $\pi/2$, и величина $\delta^{t_2} < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta < \pi/2$ угол θ_e меньше $\pi/2$, и величина $\delta^{t_2} > 0$. Для кристаллов II типа (KCl, NaCl) ситуация обратная (см. рис. 1.2, 1.3, кривые 2).

Более интересные результаты дает анализ спектра и векторов поляризации для диагонального сечения: $\varphi = \pi/4$, $\mathbf{n} = (\sin \theta/\sqrt{2}, \sin \theta/\sqrt{2}, \cos \theta)$, $\xi = 2n_x^2(1 - 3/2n_x^2)$, $\eta = n_x^4(1 - 2n_x^2)$. В этом случае кубическое уравнение (1.3) может быть факторизовано для функции $\psi_x = \varepsilon + (k-1)n_x^2$:

$$\psi_x[\psi_x^2 - \psi_x(1 + 3(k-1)n_x^2) + 2k(k-1)n_x^2(3n_x^2 - 1)] = 0. \quad (1.11)$$

Одно из решений этого уравнения $\psi_x^{t_1} = 0$ дает:

$$\varepsilon^{t_1} = -\frac{1}{2}(k-1)\sin^2 \theta, \quad S^{t_1}(\theta, \frac{\pi}{4}) = S_{[100]}^t \sqrt{1 - \frac{\Delta C}{2c_{44}} \sin^2 \theta}. \quad (1.12)$$

Проведенный анализ показал, что вектор поляризации для этой моды перпендикулярен диагональной плоскости, и это решение является единственным:

$$\mathbf{e}^{t_1} = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0), \quad (\mathbf{e}^{t_1} \mathbf{n}) = 0. \quad (1.13)$$

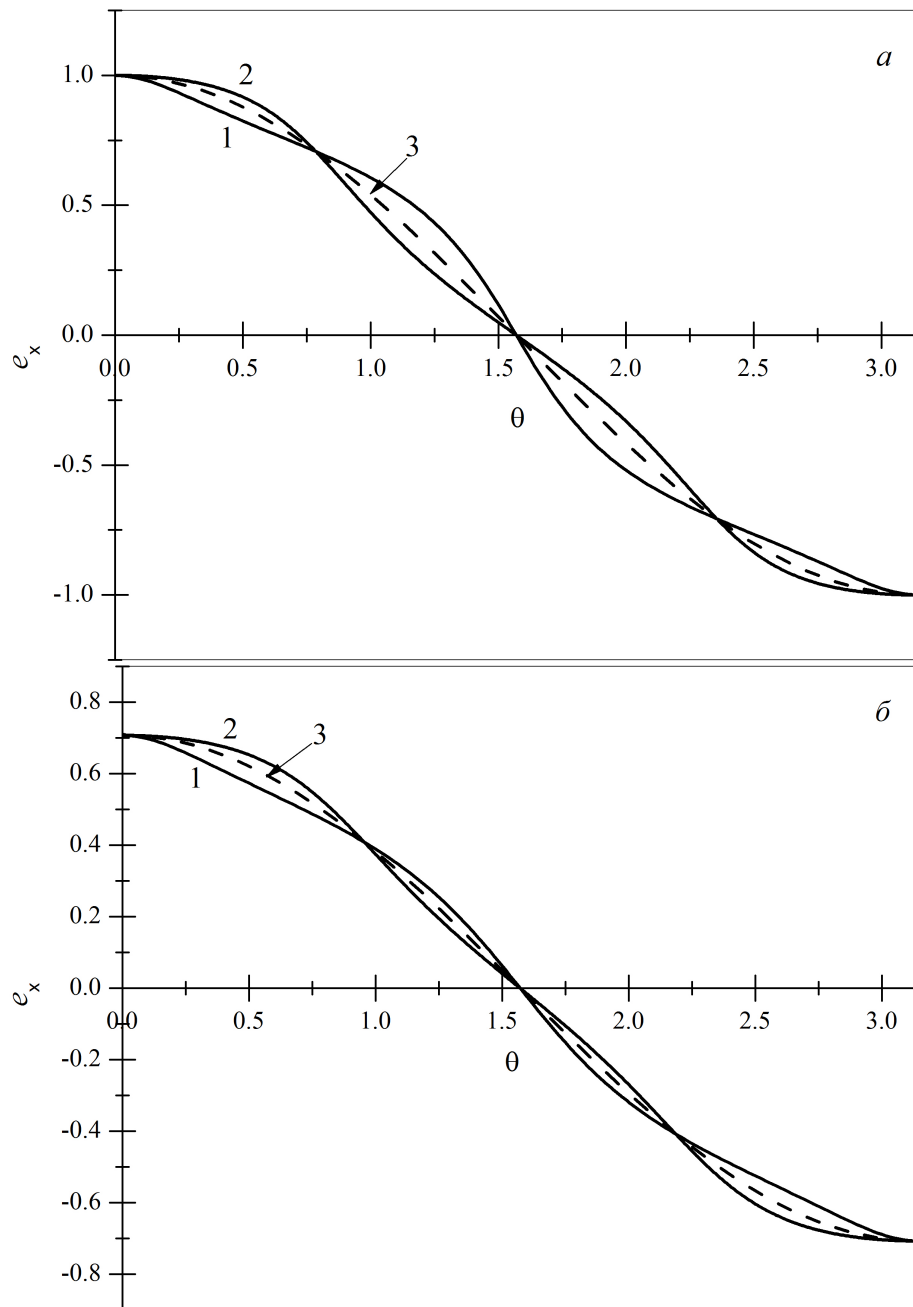


Рисунок 1.3. Угловые зависимости x -компоненты векторов поляризации e^{t2} квазиперечных мод в кристаллах Si (кривые 1) и NaCl (кривые 2), построенные для волновых векторов, расположенных в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Штриховые кривые 3 – для соответствующих компонент чистых мод.

Таким образом, эта мода является чисто поперечной, несмотря на то, что спектр фононов для нее является анизотропным (см. рис. 1.1(в,з)). Этот результат может показаться неожиданным на первый взгляд, поскольку согласно представлениям, основанным на модели изотропной среды, следует, что чистым модам соответствуют изотропные спектры колебательных ветвей, а анизотропия спектра поперечных колебательных мод должна приводить к отклонению от взаимной перпендикулярности волнового вектора фонона и вектора поляризации. Однако из симметричного анализа упругих волн в кристаллах [39] следует, что для волновых векторов, лежащих в плоскости симметрии или в плоскости, перпендикулярной оси симметрии четного порядка, одна из трех нормальных волн будет чисто поперечной, а ее смещение будет перпендикулярным рассматриваемой плоскости. Диагональная плоскость ($\varphi = \pi/4$) является как раз плоскостью симметрии кубического кристалла, поэтому полученный выше результат согласуется с анализом, проведенным в [39]. Отметим, что мода ε^{t_1} является быстрой для кубических кристаллов I типа (и медленной для кристаллов II типа) в области углов $-\theta_{111} < \theta < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta < \pi + \theta_{111}$ (θ_{111} – угол между осью Z и направлением [111]), а в области углов $\theta_{111} < \theta < \pi - \theta_{111}$ и $\pi + \theta_{111} < \theta < 2\pi - \theta_{111}$ она является медленной для кубических кристаллов I типа (и быстрой для кристаллов II типа).

Два других решения уравнения (1.11) соответствуют продольной и второй поперечной моде:

$$\psi_x^{L,t_2} = \frac{1}{2}(1 + 3(k-1)n_x^2) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(1 + 3(k-1)n_x^2)^2 - 2k(k-1)n_x^2(3n_x^2 - 1)},$$

$$S^{t_2} = S_{[100]}^t \sqrt{1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \varepsilon^{t_2}}, \quad \varepsilon^{t_2} = \psi_x^{t_2} - (k-1)n_x^2. \quad (1.14)$$

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

$$e_x^{t_2} = e_y^{t_2} = \frac{n_x \psi_z \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2}, \quad e_z^{t_2} = \frac{n_z \psi_x \text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} = -\sqrt{1 - 2(e_x^{t_2})^2},$$

$$\psi_x = \psi_y = \varepsilon^{t_2} + (k-1)n_x^2, \quad \psi_z = \varepsilon^{t_2} + (k-1)n_z^2, \quad \psi_2 = \sqrt{2n_x^2 \psi_z^2 + n_z^2 \psi_x^2}, \quad (1.15)$$

$$\delta^{t_2} = (\mathbf{e}^{t_2} \mathbf{n}) = \frac{\text{sign}(n_z \psi_z)}{\psi_2} (2n_x^2 \psi_z + n_z^2 \psi_x) = \cos(\theta_e - \theta).$$

Максимальное значение продольной компоненты поперечной моды δ^{t_2} составляет 16.5% от чистой моды для кристаллов Ge и достигает 27% для кристалла KCl. Поскольку анизотропия упругих свойств кубических кристаллов убывает при переходе от кристаллов Ge к кристаллам Si и

алмаза, то максимальные значения δ^{t_2} уменьшаются до 13.8% от чистой моды для кристаллов Si, 9.3% для алмаза и 10.4% для NaCl (см. рис. 1.2).

Из рисунка 1.3б видно, что величины x -компонент векторов поляризации e^{t_2} квазипоперечных мод в кристаллах Si и NaCl (кривые 1 и 2) и соответствующие им компоненты для чистой моды $e_0^{t_2} = (\cos \theta / \sqrt{2}, \cos \theta / \sqrt{2}, -\sin \theta)$, для которой величина $(e_0^{t_2} \mathbf{n}) = 0$ для обоих видов кристаллов, отличаются более значительно, чем величины δ^{t_2} . Из выражений (1.15) следует, что z -компоненты векторов поляризации e^{t_2} могут быть однозначно определены через x -компоненты. Поэтому мы их не приводим. Как видно из рисунков 1.2 и 1.3, (кривые 1) для кристаллов I типа (Ge, Si) в области углов $0 < \theta < \pi/4$ угол θ^{t_2} превосходит $\pi/2$, и величина $\delta^{t_2} < 0$, а для области углов $\pi/4 < \theta < \pi/2$ угол θ^{t_2} меньше $\pi/2$, и величина $\delta^{t_2} > 0$. Для кристаллов II типа (KCl, NaCl) ситуация со знаками величины δ^{t_2} обратная (см. рис. 1.2, 1.3, кривые 2). Итак, поведение векторов поляризации в кристаллах I и II типа существенно различается.

Основные результаты этого раздела могут быть сформулированы следующим образом [25]:

1. Все кубические кристаллы могут быть разделены на два типа: кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов первого и второго типа качественно отличается.
2. Вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания для кубических кристаллов и первого и второго типа мал, и им можно пренебречь. Однако вклад продольной компоненты в квазипоперечные колебания может достигать 24% для кристаллов KCl, и его необходимо учитывать.
3. Для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба или в диагональной плоскости куба, поперечные моды с векторами поляризации, перпендикулярными этим плоскостям, являются чистыми модами, а колебательные моды с векторами поляризации, лежащими в указанных плоскостях, являются смешанными поперечно-продольными модами.

1.2 Аппроксимация спектра тепловых фононов в кубических кристаллах

В выполненных к настоящему времени экспериментальных исследованиях спектр фононов в кубических кристаллах измерялся, как правило, только в симметричных направлениях [58, 59]. Для анализа температурных зависимостей теплопроводности нам необходимо знать спектр фононов во всей зоне Бриллюэна. Модель анизотропного континуума позволяет решить эту задачу, но она справедлива только для волновых векторов, гораздо меньших дебаевского волнового вектора q_D . Основываясь на данных по неупругому рассеянию нейтронов [58], проведём аппроксимацию фононного спектра для кристаллов кремния на всю зону Бриллюэна. Для этого представим его в виде [40]:

$$\omega_q^\lambda = S_0^\lambda(\theta, \varphi) q \{1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)\}, \quad (1.16)$$

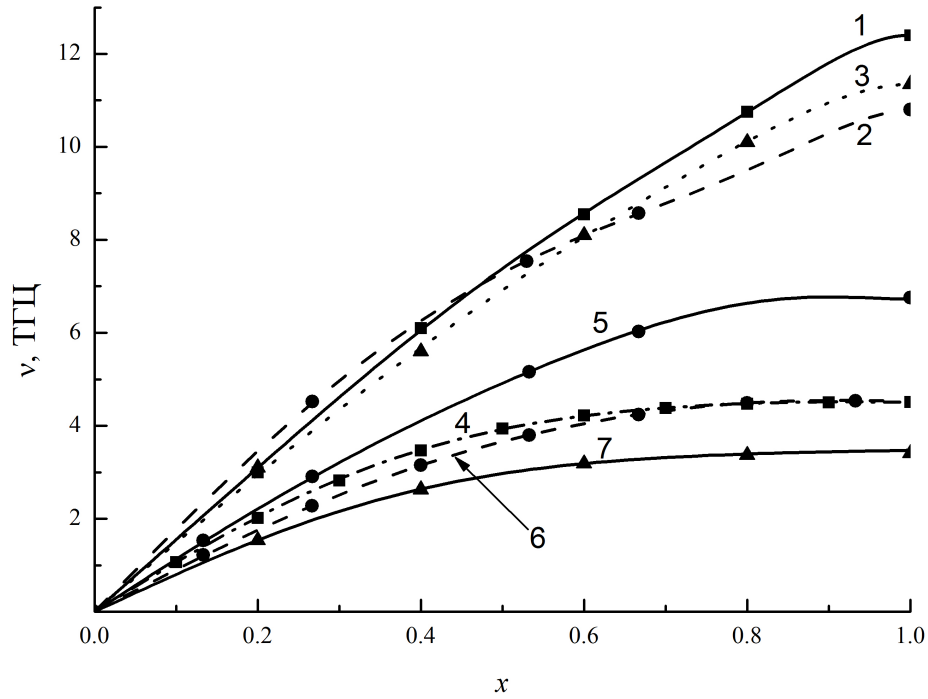


Рисунок 1.4. Зависимости спектра $\nu^\lambda = \omega^\lambda/2\pi$ в кремнии продольных (кривые 1, 2, 3) и поперечных (кривые 4, 5, 6, 7) фононов от приведенного волнового вектора $x = q/q_{max}$ при аппроксимации экспериментальных данных [58] полиномом седьмой степени для симметричных направлений: [100] - кривые 1 и 4, [110] - кривые 2, 5 и 6 (5-быстрая поперечная мода, 6-медленная), [111] - кривые 3 и 7. Символы - экспериментальные данные [58].

$$f^\lambda(x, \theta, \varphi) = A^\lambda(\theta, \varphi)x^2 - B^\lambda(\theta, \varphi)x^4 + C^\lambda(\theta, \varphi)x^6 - \dots$$

Здесь функция $f^\lambda(x, \theta, \varphi)$ описывает дисперсию тепловых фононов, коэффициенты $A^\lambda(\theta, \varphi)$, $B^\lambda(\theta, \varphi)$, $C^\lambda(\theta, \varphi)$ характеризуют угловые зависимости спектра фононов, $x = q/q_{max}$ - приведенный волновой вектор, а $q_{max}(\theta, \varphi)$ - волновой вектор на границе зоны Бриллюэна. Для симметричных направлений он имеет вид:

$$q_{max}^{[100]} = 2\pi/a, \quad q_{max}^{[110]} = (2\pi/a)(3\sqrt{2}/4), \quad q_{max}^{[111]} = (2\pi/a)(\sqrt{3}/2), \quad (1.17)$$

где a - постоянная решетки (для кремния $a = 5.431 \text{ \AA}$). Величина $q_{max}(\theta, \varphi)$ может быть определена следующими соотношениями:

$$q_1(\theta, \varphi) = \frac{q_{max}^{[100]}}{|n_1|}, \quad q_2(\theta, \varphi) = \frac{q_{max}^{[100]}}{|n_2|}, \quad q_3(\theta, \varphi) = \frac{q_{max}^{[100]}}{|n_3|}, \quad q_4(\theta, \varphi) = \frac{3/2q_{max}^{[100]}}{|n_1| + |n_2| + |n_3|},$$

$$q_{max}(\theta, \varphi) = \min\{q_1(\theta, \varphi), q_2(\theta, \varphi), q_3(\theta, \varphi), q_4(\theta, \varphi)\}. \quad (1.18)$$

В длинноволновом пределе $x \ll 1$ можно положить $f^\lambda(x, \theta, \varphi) = 0$. Тогда аппроксимация (1.16) переходит в модель анизотропного континуума (1.1), в которой анизотропия спектра определяется фазовой скоростью $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$.

Аппроксимация экспериментального спектра производится в два этапа. На первом этапе мы аппроксимируем экспериментально измеренный спектр фононов для симметричных направлений, используя разложение по степеням приведенного волнового вектора. Для этого зафиксируем

ем углы $\theta = \theta_{[I]}$ и $\varphi = \varphi_{[I]}$, соответствующие симметричным направлениям $[I] = [100]$, $[110]$ или $[111]$, и, используя разложение экспериментального спектра по степеням приведенного волнового вектора x , находим коэффициенты $A^\lambda(\theta_{[I]}, \varphi_{[I]})$, $B^\lambda(\theta_{[I]}, \varphi_{[I]})$ и $C^\lambda(\theta_{[I]}, \varphi_{[I]})$ для каждой акустической моды. Значения этих коэффициентов представлены в таблице 1.2. Как видно из рисунка 1.4, аппроксимация спектра фононов в кристаллах Si полиномом седьмой степени достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные для всех колебательных мод в симметричных направлениях. Усредненная погрешность этой аппроксимации составляет 0.9% для продольных фононов, а для поперечных – 1.3%. Как явствует из таблицы 1.2, влияние дисперсии на спектр продольных фононов максимально в направлении $[110]$ и минимально в направлении $[100]$: коэффициент $A_{[101]}^L$, характеризующий роль дисперсии при $x \ll 1$ в направлении $[110]$, превосходит коэффициенты $A_{[001]}^L$ и $A_{[111]}^L$ в 3.4 и 2.6 раза, соответственно. Заметим, что анизотропия и эффекты, связанные с дисперсией, для продольных фононов в Si значительно меньше, чем для поперечных. Для поперечных мод в Si при $0.5 \leq x \leq 1$ имеются плоские участки, а поперечная мода t_1 имеет максимум при $x = 0.9$. Эти особенности приводят к появлению соответствующих пиков в плотности фононных состояний [58].

На втором этапе мы экстраполируем спектр фононов, измеренный для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна, используя разложение по кубическим гармоникам аналогично тому, как это сделано в работах [25, 40]. Согласно [25], выражения для скоростей звука, полученные в модели анизотропного континуума, с хорошей точностью могут быть аппроксимированы в линейном приближении по кубическим гармоникам $\xi(\theta, \varphi)$ и $\eta(\theta, \varphi)$. Усредненная по всем направлениям погрешность для Si составляет менее 1% (см. [25], рис. 2). Аналогично [25, 40] представим коэффициенты $A^\lambda(\theta, \varphi)$, $B^\lambda(\theta, \varphi)$, $C^\lambda(\theta, \varphi)$ для всей зоны Бриллюэна в линейном приближении по кубическим гармоникам $\xi(\theta, \varphi)$ и $\eta(\theta, \varphi)$:

$$\begin{aligned} A^\lambda(\theta, \varphi) &= A_{[100]}^\lambda \{1 + a_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + a_2^\lambda \eta(\theta, \varphi)\}, \\ B^\lambda(\theta, \varphi) &= B_{[100]}^\lambda \{1 + b_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + b_2^\lambda \eta(\theta, \varphi)\}, \\ C^\lambda(\theta, \varphi) &= C_{[100]}^\lambda \{1 + c_1^\lambda \xi(\theta, \varphi) + c_2^\lambda \eta(\theta, \varphi)\}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Учитывая, что для симметричных направлений типа $[001]$ $\xi(0, 0) = \eta(0, 0) = 0$, для $[101]$ $\xi(\pi/4, 0) = 0.25$, $\eta(\pi/4, 0) = 0$, для $[111]$ $\xi(\theta_{111}, \pi/4) = 1/3$, $\eta(\theta_{111}, \pi/4) = 1/27$ находим соответствующие коэффициенты (см. Таблицу 1.2). Например, коэффициенты a_1^λ и a_2^λ могут быть представлены в виде:

$$a_1^\lambda = 4(A_{[110]}^\lambda - A_{[100]}^\lambda)/A_{[100]}^\lambda, \quad a_2^\lambda = 9(3A_{[111]}^\lambda - 4A_{[110]}^\lambda + A_{[100]}^\lambda)/A_{[100]}^\lambda. \quad (1.20)$$

Аналогично находятся коэффициенты b_1^λ и b_2^λ . Их значения приведены в таблице 1.2. Окончательное выражение для спектра фононов можно представить в виде:

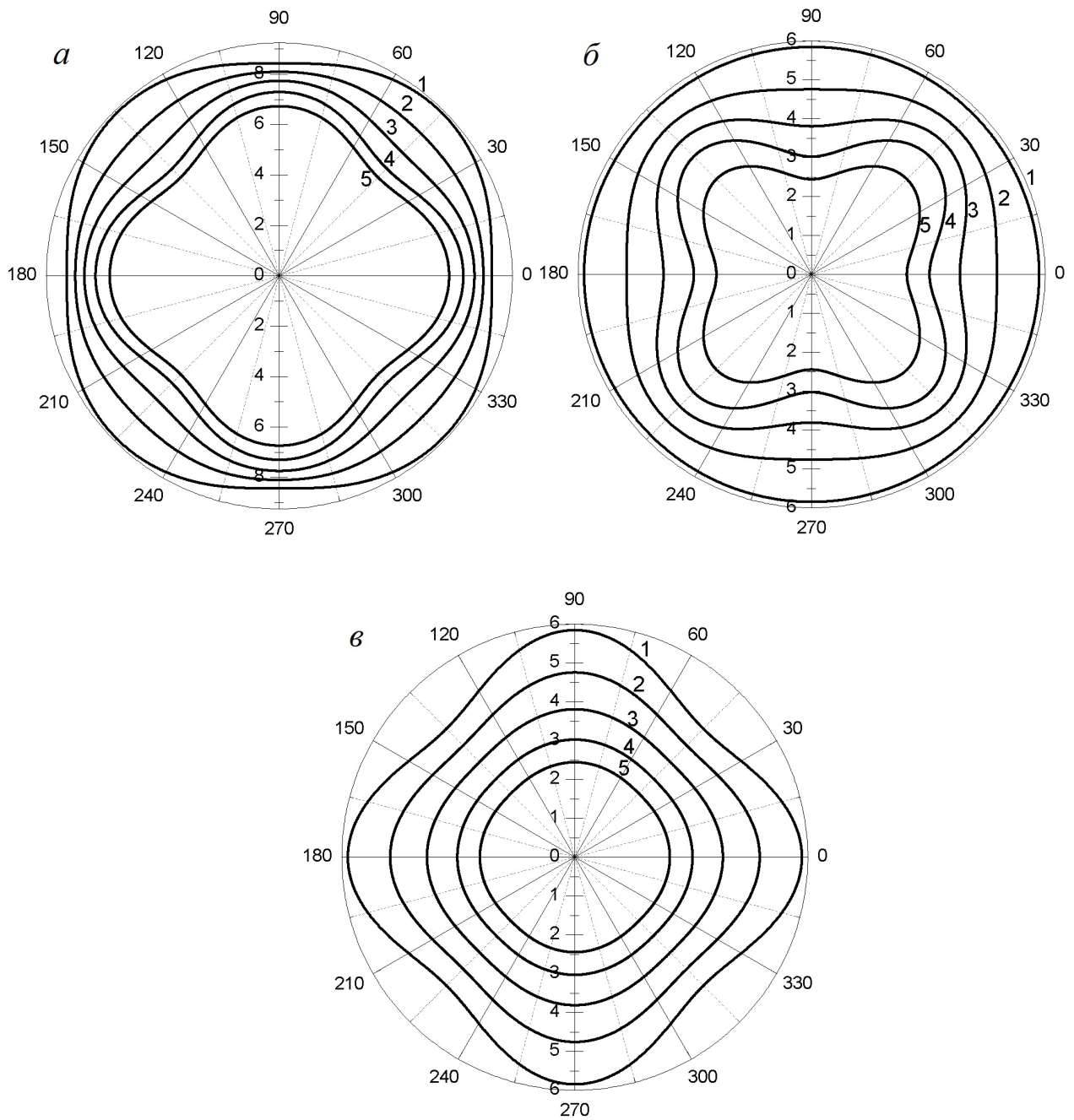


Рисунок 1.5. Угловые зависимости фазовых скоростей фонона $S^\lambda(x, \theta, 0)$ (10^5 см/с) для волновых векторов фононов в плоскости грани куба в кристаллах кремния: (а) - для продольных, (б) - для быстрых и (в) - для медленных поперечных фононов от угла θ при значениях приведенного волнового вектора $x = 0.01$ (кривые 1), $x = 0.4$ (кривые 2), $x = 0.6$ (кривые 3), $x = 0.8$ (кривые 4), $x = 1$ (кривые 5).

Таблица 1.2. Параметры, определяющие аппроксимацию спектра фононов в кремнии, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов [58], на всю зону Бриллюэна.

Продольная мода				Поперечные моды			
$A_{[001]}^L$	0.27	a_1^L	9.60	$A_{[001]}^t$	1.35	a_1^{t1}	-1.91
$B_{[001]}^L$	0.13	a_2^L	-77.67	$B_{[001]}^t$	1.22	a_2^{t1}	17.25
$C_{[001]}^L$	0.064	b_1^L	18.21	$C_{[001]}^t$	0.45	b_1^{t1}	-1.63
$A_{[101]}^L$	0.91	b_2^L	-129.44	$A_{[101]}^{t1}$	0.71	b_2^{t1}	14.94
$B_{[101]}^L$	0.72	c_1^L	8.86	$B_{[101]}^{t1}$	0.72	c_1^{t1}	-0.26
$C_{[101]}^L$	0.21	c_2^L	-30.51	$C_{[101]}^{t1}$	0.43	c_2^{t1}	2.66
$A_{[111]}^L$	0.35			$A_{[101]}^{t2}$	0.90	a_1^{t2}	-1.34
$B_{[111]}^L$	0.30			$B_{[101]}^{t2}$	0.56	a_2^{t2}	12.12
$C_{[111]}^L$	0.18			$C_{[101]}^{t2}$	0.16	b_1^{t2}	-2.18
				$A_{[111]}^t$	1.35	b_2^{t2}	19.81
				$B_{[111]}^t$	1.23	c_1^{t2}	-2.56
				$C_{[111]}^t$	0.46	c_2^{t2}	23.44

$$\begin{aligned}
\omega_q^\lambda &= \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi)x \{1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)\}, \quad \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi)q_{\max}(\theta, \varphi) \\
f^\lambda(x, \theta, \varphi) &= f_{[100]}^\lambda(x) + f_1^\lambda(x)\xi(\theta, \varphi) + f_2^\lambda(x)\eta(\theta, \varphi), \\
f_{[100]}^\lambda(x) &= A_{[100]}^\lambda x^2 - B_{[100]}^\lambda x^4 + C_{[100]}^\lambda x^6 - \dots, \\
f_1^\lambda(x) &= 4x^2 [A_{[110]}^\lambda - A_{[100]}^\lambda - (B_{[110]}^\lambda - B_{[100]}^\lambda)x^2 + (C_{[110]}^\lambda - C_{[100]}^\lambda)x^4 - \dots], \\
f_2^\lambda(x) &= 9x^2 [(3A_{[111]}^\lambda - 4A_{[110]}^\lambda + A_{[100]}^\lambda) - (3B_{[111]}^\lambda - 4B_{[110]}^\lambda + B_{[100]}^\lambda)x^2 + \\
&\quad + (3C_{[111]}^\lambda - 4C_{[110]}^\lambda + C_{[100]}^\lambda)x^4 - \dots].
\end{aligned} \tag{1.21}$$

Предложенная аппроксимация сохраняет кубическую анизотропию спектра, она позволяет анализировать изменение анизотропии спектра при переходе от случая длинных волн ($x \ll 1$) к случаю коротковолновых фононов ($x \sim 1$). Проведено сравнение спектров, рассчитанных согласно формулам (1.16) - (1.21) для Si с экспериментальными данными [58] для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) и в диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$). Как показал проведенный анализ, при $x \leq 0.2$ спектр хорошо описывается моделью анизотропного континуума. При значениях $x \approx 0.5$ наше приближение описывает все особенности спектра колебательных мод с погрешностью, не превышающей 5%. Однако по мере приближения к границе зоны Бриллюэна погрешность аппроксимации возрастает. На границе зоны Бриллюэна в направлениях отличных от симметричных погрешность достигает 20%. В дальнейшем, чтобы не

усложнять задачу расчета теплопроводности, ограничимся линейной по кубическим гармоникам аппроксимацией спектра согласно выражениям (1.16) - (1.21).

В качестве примера рассмотрим изменение фазовой скорости фононов в Si при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам:

$$S^\lambda(x, \theta, \varphi) = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)\}. \quad (1.22)$$

Как видно из рисунков 1.5, анизотропия фазовой скорости фононов качественно изменяется при переходе от модели анизотропного континуума $x = 0.01$ (рис. 1.5, кривые 1) к фазовым скоростям на границе зоны Бриллюэна $x = 1.0$ (рис. 1.5, кривые 5). Если при $x = 0.01$ в направлениях [001] скорость продольных фононов – минимальна, а в направлениях [111] – максимальна, то при $x = 1.0$ максимальное значение остается в направлениях типа [111], для направлений [001] она значительно возрастает, однако остается на 6% меньше, чем в [111], тогда как минимальное значение реализуется в направлениях [101] (см. рис. 1.5а). Качественно изменяется и анизотропия фазовых скоростей поперечных фононов обеих колебательных ветвей (см. рис. 1.5а и 1.5б). Так, например, для волновых векторов в плоскости грани куба быстрая мода t_1 изотропна при $x = 0.01$, но становится анизотропной при $x=1.0$ с максимальной скоростью вдоль направления [101]. В противоположность этому медленная мода t_2 , являющаяся анизотропной в длинноволновом пределе $x \ll 1$, становится почти изотропной при $x = 1.0$.

Для продольных фононов дисперсия не приводит к качественному изменению спектра, тогда как на поперечные фононы дисперсия оказывает более сильное влияние (см. рисунок 1.4). Для всех симметричных направлений у них появляются плоские участки спектра в коротковолновой области $0.5 < x < 1$, где групповая скорость имеет аномально малые величины (см. рис. 1.4). Как мы увидим далее, качественное изменение анизотропии спектра тепловых фононов приводит к изменению направлений, в которых фокусируются фононы различных колебательных ветвей.

1.3 Расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge с использованием аппроксимационного спектра фононов

Чтобы выяснить насколько хорошо предложенная нами аппроксимация спектра тепловых фононов описывает истинный спектр частот, вычислим теплоемкость кристаллов Si и Ge и сравним результаты расчета с экспериментальными данными [60, 61].

Рассмотрим два подхода к вычислению спектра частот фононов: 1) модель анизотропного континуума, когда частота фонона ω_q^λ пропорциональна волновому вектору q и определяется формулой (1.1); 2) с учетом дисперсии тепловых фононов (1.16). Для кристалла Ge параметры, определяющие аппроксимацию спектра фононов, получены в работе [40]. Сравним результаты вычислений с экспериментом [60, 61]. Молярная теплоемкость C_V^λ имеет вид [12, 35, 62]:

$$C_V^\lambda = V_M C_V^\lambda = \frac{k_B V_M}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} (z^\lambda)^2 \frac{\exp(z^\lambda)}{(\exp(z^\lambda) - 1)^2}, \quad z^\lambda = \frac{\hbar \omega_q^\lambda}{k_B T}, \quad (1.23)$$

где k_B - постоянная Больцмана, T – температура, ω_q^λ - частота фонона с поляризацией λ , C_V^λ - теплоемкость при постоянном объеме, V_M - молярный объем, который равен 12.10 и 13.64 см³/моль соответственно для кристаллов Si и Ge. При интегрировании по \mathbf{q} в выражении (1.23) модуль волнового вектора q обрезается на дебаевском радиусе [12,62]

$$q_D = (6\pi^2 N/V)^{1/3} = (6\pi^2 N_A/V_M)^{1/3}, \quad (1.24)$$

где N – число элементарных ячеек, V – объем кристалла, $N_A \approx 6.022 \cdot 10^{23}$ см³/моль - число Авогадро.

При температурах, гораздо меньших температуры Дебая T_D , из выражения (1.23) следует, что теплоемкость пропорциональна T^3 (*закон Дебая*). В случае высоких температур ($T \gg T_D$) из формулы (1.23) получаем известный классический *закон Дюлонга и Пти*, согласно которому молярная теплоемкость всех твердых тел стремится к одному и тому же значению

$$C_V^\lambda = 3k_B N_A = 3R. \quad (1.25)$$

В эксперименте [60, 61] измеряли теплоемкость при постоянном давлении C_P для кристаллов Si и Ge. В работе [61] показано, что разница $C_P - C_V$ для исследованных кристаллов мала (составляет порядка $(1 - 23) \cdot 10^{-3}$ Дж/(моль К)) и ей можно пренебречь, полагая $C_P \approx C_V$. Сравним результаты расчета теплоемкости в модели анизотропного континуума с экспериментальными данными. Как видно из рисунка 1, при температурах ниже 6 и 10 К (соответственно для кристаллов Ge и Si) кривые, рассчитанные в модели анизотропного континуума (пунктирные кривые), хорошо согласуются с данными [60,61]. При более высоких температурах модель анизотропного континуума дает заниженные значения теплоемкости для кристаллов Ge и Si. Причем, максимальное отклонение от эксперимента для Si имеет место при $T = 40-50$ К. Рассчитанные значения теплоемкости оказываются в 2.7 раза меньше данных [60,61] (см. рис. 1.6б, кривая 1а). Расчет теплоемкости с использованием аппроксимационного спектра тепловых фононов (1.16) дает лучшее согласие с экспериментом: при температурах, меньших 35 К, отклонение не превышает 5%. При этом результаты расчета лежат выше экспериментальных данных. Максимальная погрешность для Si достигается при $T = 90-100$ К и составляет 48% (см. рис. 1.6б, кривая 1). При $T > 300$ К молярная теплоемкость для обеих моделей стремится к значению $3R$, при этом вклады в теплоемкость от различных ветвей фононного спектра оказываются равными друг другу (см. рисунок 1.6).

Во всей области температур доминирующий вклад в теплоемкость вносит медленная поперечная мода (кривые 3, 3а). Например, для кристалла Si при $T = 2.2$ К ее вклад составляет 53%. Вклад продольных фононов значительно меньше вкладов поперечных фононов. Он составляет 9%.

Итак, мы показали, что предложенная нами аппроксимация спектра тепловых фононов удовлетворительно описывает экспериментальные данные по теплоемкости кристаллов Ge и Si и может быть использована для расчета решеточной теплопроводности кубических кристаллов.

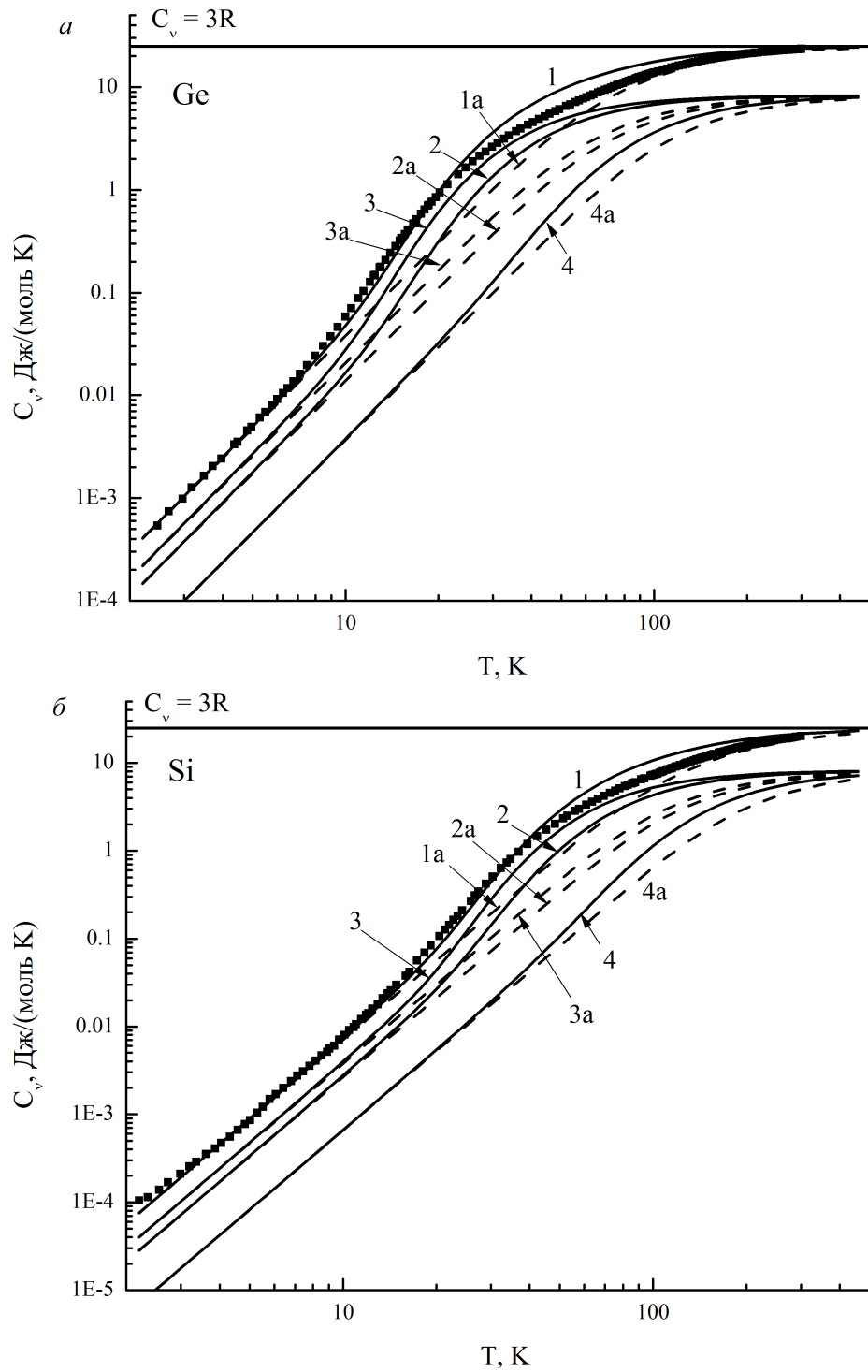


Рисунок 1.6. Температурные зависимости молярной теплоемкости кристаллов Ge (а) и Si (б) в модели анизотропного континуума (кривые 1а, 2а, 3а, 4а) и с учетом дисперсии тепловых фононов (кривые 1, 2, 3, 4). Кривые 1 – полная теплоемкость, кривые 2 – для быстрой поперечной моды, кривые 3 – для медленной поперечной моды и кривые 4 – для продольной моды. Прямая $C_v = 3R = 24.9$ Дж/(моль К) - классический закон Дюлонга и Пти (1.25). Символы – эксперимент [60, 61].

1.4 Групповая скорость и фокусировка фононов в кубических кристаллах

Важной характеристикой, определяющая фононный транспорт и фокусировку фононов, является групповая скорость. В системе координат по ребрам куба она может быть представлена в виде [40]:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_g^\lambda(x, \theta, \varphi) &= d\omega_q^\lambda/d\mathbf{q} = S_0^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(x, \theta, \varphi) \\ \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(x, \theta, \varphi) &= V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \mathbf{n} + S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi) \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi) \mathbf{e}_\varphi, \end{aligned} \quad (1.26)$$

$$V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) = 1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi) - x \frac{\partial}{\partial x} f^\lambda(x, \theta, \varphi). \quad (1.27)$$

Вектора

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \quad (1.28)$$

$$\mathbf{e}_\theta = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta), \quad (1.29)$$

$$\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0) \quad (1.30)$$

образуют тройку взаимно ортогональных единичных векторов. Безразмерные компоненты групповой скорости $S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi)$ и $S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi)$ определяются выражениями:

$$\begin{aligned} S_\theta^\lambda(x, \theta, \varphi) &= \left[\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \xi} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_1^\lambda(x) \right] \frac{\partial \xi}{\partial \theta} + \\ &+ \left[\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \eta} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_2^\lambda(x) \right] \frac{\partial \eta}{\partial \theta}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$\begin{aligned} S_\varphi^\lambda(x, \theta, \varphi) &= \frac{1}{\sin \theta} \left[\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \xi} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_1^\lambda(x) \right] \frac{\partial \xi}{\partial \varphi} + \\ &+ \frac{1}{\sin \theta} \left[\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \eta} (1 - f^\lambda(x, \theta, \varphi)) - f_2^\lambda(x) \right] \frac{\partial \eta}{\partial \varphi}, \end{aligned} \quad (1.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \xi} &= \left[\left(\frac{S_{[100]}^t}{S_0^\lambda} \right)^2 \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}} Z_\lambda \right] \frac{1.5(k^2 - 1)}{r^2} \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{1.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(k - 1)^2(1 + 2k)}{r^3 \sqrt{1 - p^2}} \operatorname{tg} Q^\lambda \right\}, \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\frac{1}{S_0^\lambda} \frac{\partial S_0^\lambda}{\partial \eta} = \left[\left(\frac{S_{[100]}^t}{S_0^\lambda} \right)^2 \frac{c_{11} - c_{44}}{2c_{44}} Z_\lambda \right] \frac{4.5(k-1)^2(1+2k)}{r^3 \sqrt{1-p^2}} \operatorname{tg} Q^\lambda, \quad (1.34)$$

$$Q^L = \frac{Q}{3}, \quad Q^{t_1, t_2} = \frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3}, \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial \theta} = \sin 2\theta [\cos 2\theta + 0.5(\sin \theta \sin 2\varphi)^2], \quad \frac{\partial \xi}{\partial \varphi} = 0.5 \sin^4 \theta \sin 4\varphi, \quad (1.36)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \theta} = 0.25 \sin 2\theta (\sin \theta \sin 2\varphi)^2 [3 \cos^2 \theta - 1], \quad \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} = 0.5 \sin^4 \theta \cos^2 \theta \sin 4\varphi. \quad (1.37)$$

Компоненты групповой скорости фононов в декартовой системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} V_{gx}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \cos \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \cos \varphi - S_\varphi^\lambda \sin \varphi \}, \\ V_{gy}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \sin \theta \sin \varphi + S_\theta^\lambda \cos \theta \sin \varphi + S_\varphi^\lambda \cos \varphi \}, \\ V_{gz}^\lambda(x, \theta, \varphi) &= S_0^\lambda(\theta, \varphi) \{ V_n^\lambda(x, \theta, \varphi) \cos \theta - S_\theta^\lambda \sin \theta \}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

В упруго анизотропных кристаллах из-за неколлинеарности фазовой и групповой скоростей фононный поток, излучаемый точечным источником тепла, фокусируется вдоль определенных направлений в кристаллической решетке [20, 55]. Для иллюстрации этого эффекта на рисунке 1.7 приведены три случая. В изотропной среде направление групповой скорости фононов совпадает с направлением фазовой скорости и направлением волнового вектора, а компоненты групповой скорости фононов S_θ^λ и S_φ^λ равны нулю. Эффект фокусировки отсутствует: плотность состояний изотропна — она постоянна для всех направлений (см. рис. 1.7а). В кубических кристаллах анизотропия упругих свойств приводит к эффекту фокусировки фононов, т. е. возникновению направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды. Например, рис. 1.7б приведен случай, когда поверхность постоянной частоты перпендикулярна направлениям типа [100] и в сечении имеет вид квадрата. В этом случае групповая скорость значительной части фононов, перпендикулярная поверхности постоянной частоты, будет ориентирована преимущественно (фокусироваться) в направлениях типа [100]. Очевидно, что в направлениях [101] будет происходить дефокусировка фононов, поскольку поток энергии фононов отклоняется от этого направления. Если поверхности постоянной частоты имеет вид, приведенный на рис. 1.7в, то фокусировка фононов будет иметь место в направлениях [101], а дефокусировка — в направлениях [100].

Рассмотрим эффект фокусировки фононов в кремнии в более реалистичной модели анизотропного континуума. Для этого построим угловые зависимости фазовых скоростей S_0^λ и угловой компоненты S_θ^λ для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба ($\varphi = 0$) (см. рис. 1.8 а, в). Маленькими стрелками на рисунке 1.8а отмечены направления угловой компоненты вектора групповой скорости S_θ^λ (рис. 1.8а). Заметим, что в изотропной среде $S_\theta^\lambda = 0$, в кубических кристаллах это равенство выполняется для быстрой поперечной моды для волновых векторов в плоскости грани куба, а также для остальных мод в симметричных направлениях [001], [101] и [111]. Угловая компонента S_θ^λ определяет отклонение вектора групповой скорости от направле-

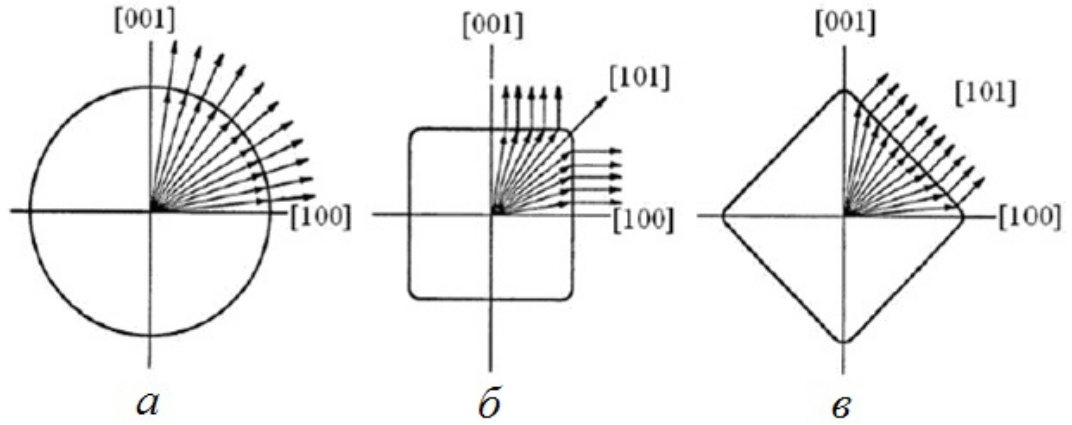


Рисунок 1.7. Схема, иллюстрирующая фокусировку фононов: (а) – изотропный случай, (б) – фокусировка в направлении [100], (в) – фокусировка в направлении [101].

ния волнового вектора (фазовой скорости). Чем больше анизотропия спектра, тем больше угловые компоненты групповой скорости S_θ^λ и S_φ^λ , и тем на больший угол будет отклоняться вектор групповой скорости от фазовой. Если в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^\lambda < 0$, как это имеет место для медленной поперечной моды при $\varphi = 0$, то вектор групповой скорости будет отклоняться от направления волнового вектора \mathbf{n} к направлению [001]. В этом случае фононы моды t_2 фокусируются в направлениях типа [001]. Если в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_\theta^\lambda > 0$, как это имеет место для продольных фононов, то вектор групповой скорости будет отклоняться от направления волнового вектора \mathbf{n} к направлению [101]. В этом случае продольные фононы фокусируются в направлениях типа [101]. Эти направления на рисунке 1.8а отмечены жирными радиальными стрелками. Таким образом, направления фокусировки фононов для различных мод в одном и том же кристалле отличаются. Как видно из рисунка 1.8а, фокусировка фононов происходит в тех направлениях, в которых фазовая скорость фононов данной колебательной моды имеет максимальное значение. Так, например, для диагональной плоскости ($\varphi = \pi/4$) фазовая скорость продольных фононов имеет максимальное значение в направлении [111], и фокусировка продольных фононов происходит именно в этом направлении.

Определим угол между групповой скоростью и волновым вектором для модели анизотропного континуума:

$$\cos \alpha^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{\mathbf{V}_g^\lambda \mathbf{q}}{V_g^\lambda q} = \frac{S_0^\lambda(\theta, \varphi)}{V_g^\lambda(\theta, \varphi)}, \alpha^\lambda(\theta, \varphi) = \pm \arccos \frac{S_0^\lambda(\theta, \varphi)}{V_g^\lambda(\theta, \varphi)}. \quad (1.39)$$

При фиксированном угле φ знак компоненты групповой скорости S_θ^λ определяет знак угла α^λ :

$$\alpha^\lambda(\theta, \varphi) = \text{sign } S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) \cdot \arccos \frac{S_0^\lambda(\theta, \varphi)}{V_g^\lambda(\theta, \varphi)}. \quad (1.40)$$

Определим угол между осью Z и направлением групповой скорости:

$$\theta_g^\lambda = \theta + \alpha^\lambda. \quad (1.41)$$

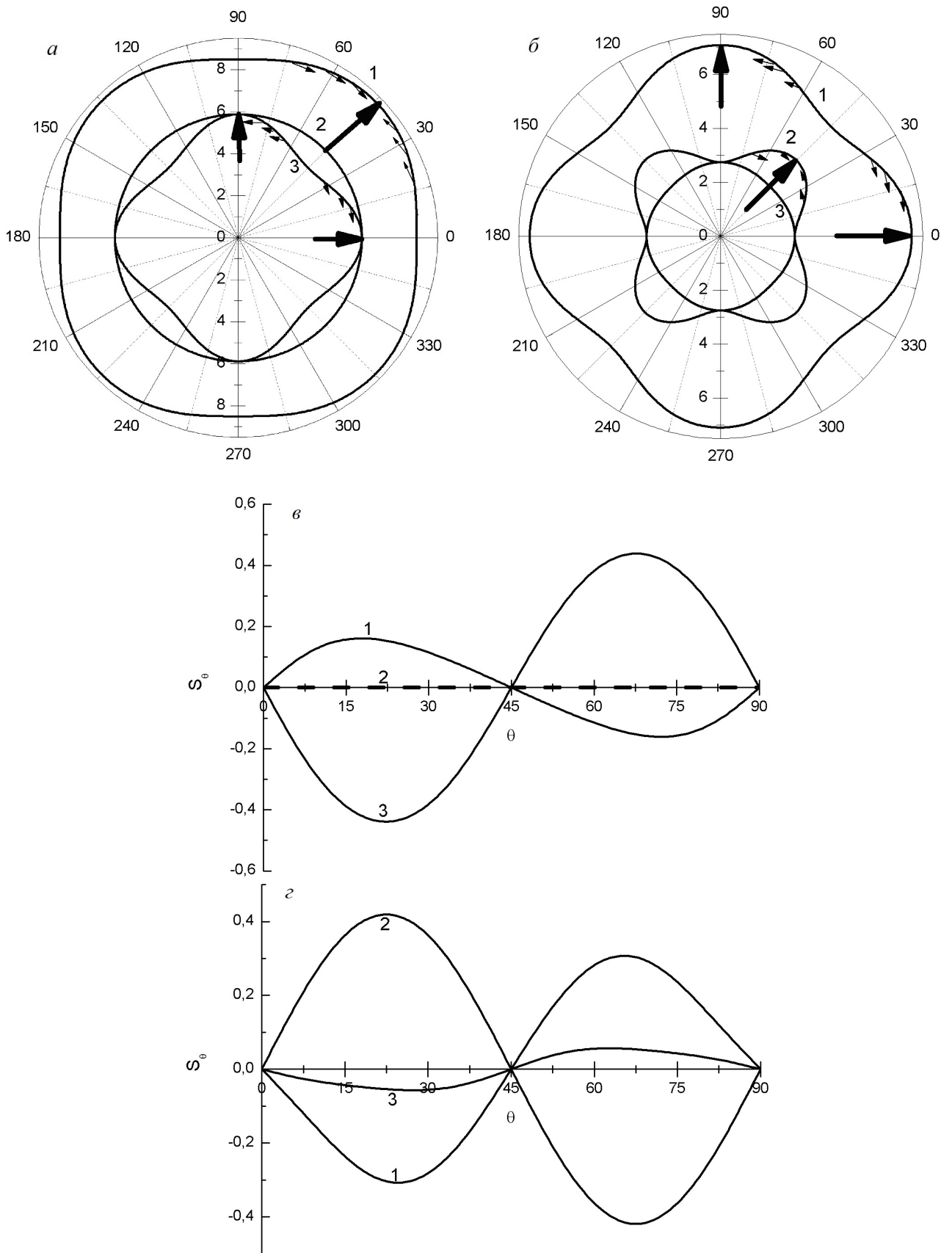


Рисунок 1.8. Угловые зависимости фазовых скоростей $S_0^\lambda(x, \theta, 0)$ (10^5 см/с) (а, б) и безразмерных компонент групповой скорости $S_\theta^\lambda(x, \theta, 0)$ (в, г) в кристаллах кремния для волновых векторов в плоскости грани куба при значениях приведенного волнового вектора $x = 0.01$ (а, в) и $x = 0.9$ (б, г). Кривые 1 - для продольных фононов, 2 - для быстрых и 3 - для медленных поперечных фононов. Направления фокусировки отмечены жирными радиальными стрелками.

Рассмотрим, как отличаются направления групповой скорости фонона и соответствующего волнового вектора в кристаллах кремния. Для этого проанализируем зависимость θ_g^λ от угла θ . Рисунок 1.9 показывает какой угол между вектором \mathbf{V}_g^λ и осью Z при заданном \mathbf{q} , а также в какую сторону отклоняется групповая скорость от направления волнового вектора. Прямая линия 4 на рисунке 1.9 соответствует изотропной среде, для которой $\theta_g^\lambda = \theta$. Если кривая лежит выше этой линии, то отклонение \mathbf{V}_g^λ от \mathbf{q} происходит в положительном направлении, если ниже – то в отрицательном. Так для продольных фононов, в плоскости грани куба (см. рис. 1.9а, кривая 1) $\theta_g^L > \theta$ для углов $\theta \in [0, \pi/4]$, а для $\theta \in [\pi/4, \pi/2]$ угол $\theta_g^L < \theta$. Это означает, что вектор \mathbf{V}_g^L отклоняется от направлений типа [100] к направлению [110], т.е. в последнем происходит локальная фокусировка продольных фононов. Причем, максимальное отклонение θ_g^L от θ в плоскости грани куба составляет $\alpha^L = 0.16$ рад. В диагональной плоскости (см. рис. 1.9б, кривая 1) $\theta_g^L > \theta$ для углов $\theta \in [0, \theta_{[111]}]$, а для $\theta \in [\theta_{[111]}, \pi/2]$ угол $\theta_g^L < \theta$. Причем, максимальное отклонение θ_g^L от θ составляет $\alpha_{\max}^L = 0.18$ рад. Это означает, что вектор \mathbf{V}_g^L отклоняется от направлений типа [110] и [100] к направлению [111], т.е. в последнем происходит фокусировка продольных фононов.

Поперечная мода t_1 и в плоскости грани куба, и в диагональной плоскости является чистой модой, причем в первом случае ее спектр является изотропным, и $\theta_g^{t_1} = \theta$ (см. рис. 1.9а, кривая 2). Во втором случае (см. рис. 1.9б, кривая 2) $\theta_g^{t_1} < \theta$ для углов $\theta \in [0, \pi/2]$, а для $\theta \in [\pi/2, \pi]$ угол $\theta_g^{t_1} > \theta$, и максимальное отклонение $\theta_g^{t_1}$ от θ составляет $\alpha_{\max}^{t_1} = 0.22$ рад. Это означает, что вектор $\mathbf{V}_g^{t_1}$ отклоняется от направлений типа [100] к направлению [110], т.е. в последнем происходит фокусировка поперечной моды t_1 .

Несколько по-иному ведет себя зависимость $\theta_g^{t_2}$ от угла θ для квазипоперечной моды t_2 . В отличие от других колебательных мод, у $\theta_g^{t_2}$ в плоскости грани куба (см. рис. 1.9а, кривая 3) и в диагональной плоскости (см. рис. 1.9б, кривая 3) в окрестности направлений типа [100] и [110] имеются локальные минимумы и максимумы. Например, в плоскости грани куба $\theta_g^{t_2} < \theta$ при углах $\theta \in [0, 0.41]$, т.е. в этом интервале направление групповой скорости $\mathbf{V}_g^{t_2}$ и соответствующего волнового вектора \mathbf{q} находятся по разные стороны от оси Z . Из-за этого возникает неопределенность в определении направления и величины групповой скорости, т.к. для одного волнового вектора найдется более одного значения $\mathbf{V}_g^{t_2}$. Как мы увидим в следующем разделе, это приведет к особенностям в коэффициенте усиления потока фононов. Максимальное отклонение $\theta_g^{t_2}$ от θ составляет $\alpha_{\max}^{t_2} = 0.41$ рад и превосходит α_{\max}^λ других колебательных ветвей, и квазипоперечная мода t_2 фокусируется в направлении [100].

В теории упругих волн важную роль играет поверхность, являющаяся геометрическим местом концов векторов медленности ζ^λ [20, 39]:

$$\zeta^\lambda = \mathbf{q}/\omega^\lambda = \mathbf{n}/S^\lambda, \quad (1.42)$$

отложенных от одной точки O . Эту поверхность принято называть поверхностью медленности [20] или поверхностью рефракции [39]. Ее можно получить из поверхности постоянной частоты, которая является геометрическим местом концов векторов $\mathbf{q} = \mathbf{n}\omega/S^\lambda$, путем деления на частоту ω .

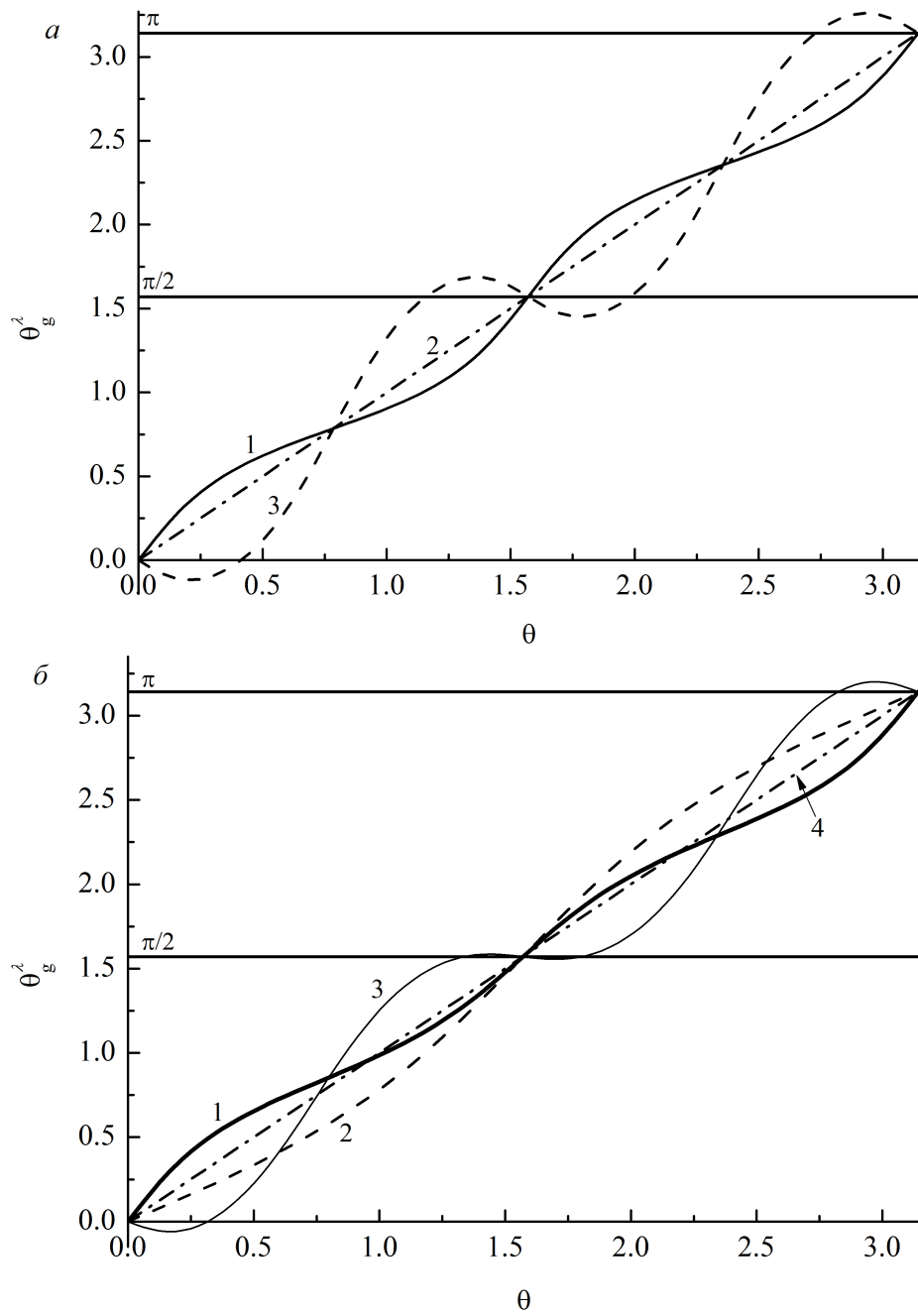


Рисунок 1.9. Зависимость угла θ_g^λ от угла θ в плоскости грани куба XZ (а) и в диагональной плоскости (б) для кремния. Кривая 1 – для продольной моды, кривая 2 – для поперечной моды t_1 , кривая 3 – для поперечной моды t_2 . Прямая 4 соответствует изотропному случаю ($\theta_g^\lambda = \theta$), в случае (а) она совпадает с прямой 2.

Как следует из определения групповой скорости фонона (1.27), при заданном волновом векторе \mathbf{q} вектор \mathbf{V}_g^λ перпендикулярен поверхности постоянной частоты и, соответственно, поверхности медленности. Графическое изображение медленности ζ^λ позволит наглядно представить, как происходит фокусировка и дефокусировка фононов. Для этого зафиксируем угол $\varphi = 0$ и построим поверхность медленности кремния для медленной поперечной моды. Из начала координат отложим волновые векторы фононов \mathbf{q} , тогда соответствующие им групповые скорости будут перпендикулярами к этой поверхности (см. рис. 1.10). В модели анизотропного континуума (см. рис. 1.10а) в окрестности направления [100] при углах $-0.41 < \theta < 0.41$ поверхность ζ^{t_2} имеет вогнутый участок, а в окрестности направления [101] – выпуклый. Поэтому, как мы видим из рис. 1.10а, векторы $\mathbf{V}_g^{t_2}$ отклоняются от направления [101] к направлению [100], то есть в направлении [100] происходит фокусировка фононов, а в направлении [101] – дефокусировка фононов в кристаллах кремния для медленной поперечной моды.

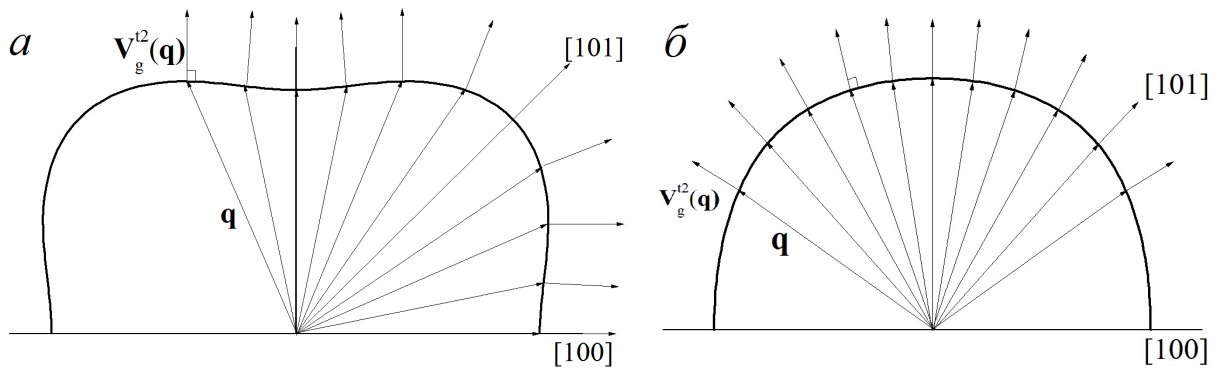


Рисунок 1.10. Иллюстрация фокусировки медленной поперечной моды в кристалле Si. Изображены сечения поверхности медленности плоскостью XZ в кристалле Si для медленной поперечной моды в случае (а) – в модели анизотропного континуума ($x = 0.01$) и в случае (б) – с учетом дисперсии фононов при $x = 0.9$. Стрелками изображены волновые вектора и соответствующие им групповые скорости фононов.

Сравним эффект фокусировки фононов для кристаллов с различным типом упругой анизотропии. В работе [25] показано, что при классификации поперечных мод необходимо учитывать их поляризацию, а принятое в большинстве работ [44, 63] для удобства численного анализа разделение поперечных мод на быстрые и медленные моды в ряде случаев не является физически корректным. При сопоставлении поперечных мод в кристаллах I и II типа следует основываться на векторах поляризации и типе мод, а не на относительном расположении ветвей спектра. Так, например, для волновых векторов, лежащих в плоскости грани куба или диагональной плоскости, поперечные моды с векторами поляризации, перпендикулярными этим плоскостям, являются чистыми модами, а колебательные моды с векторами поляризации, лежащими в указанных плоскостях, являются смешанными поперечно-продольными модами. Для волновых векторов в плоскости грани куба в кристаллах I типа ($k - 1 > 0$) «быстрая» мода t_1 с вектором поляризации перпендикулярным грани куба является чистой поперечной модой. Эквивалентная ей чистая поперечная мода с вектором поляризации перпендикулярным грани куба является «медленной» для кристаллов II типа ($k - 1 < 0$). Для волновых векторов в диагональной плоскости возникает более запутанная ситуация: для волновых векторов в диагональной плоскости мода t_1 являет-

ся быстрой для кубических кристаллов I типа (и медленной для кристаллов II типа) в области углов $-\theta_{111} < \theta < \theta_{111}$ и $\pi - \theta_{111} < \theta < \pi + \theta_{111}$ (θ_{111} – угол между осью Z и направлением $[111]$), а в области углов $\theta_{111} < \theta < \pi - \theta_{111}$ и $\pi + \theta_{111} < \theta < 2\pi - \theta_{111}$ она является медленной для кубических кристаллов I типа (и быстрой для кристаллов II типа). Для моды t_2 возникает противоположная ситуация. Поэтому в диагональной плоскости разделение поперечных мод на быстрые и медленные в этом случае не является физически корректным, и при классификации поперечных мод необходимо учитывать их векторы поляризации.

Как мы уже убедились в разделе 1.1, спектр фононов в кристаллах I и II типа качественно различается. Соответственно и направления фокусировки и дефокусировки фононов будут меняться при таком переходе. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим фокусировку быстрой поперечной моды в кристалле CaF_2 (кристалл второго типа). Эта мода является смешанной поперечно-продольной модой с вектором поляризации, лежащим в плоскости грани куба. Построим для неё сечение поверхности медленности плоскостью XZ в модели анизотропного континуума (см. Рис. 1.11). Из начала координат отложим волновые векторы фононов \mathbf{q} до поверхности медленности, а в продолжении соответствующие им групповые скорости, перпендикулярные этой поверхности (см. рис. 1.11). В окрестности направления $[100]$ поверхность медленности имеет выпуклый участок, а в окрестности направления $[101]$ – вогнутый. Поэтому, как мы видим из рис. 1.11, векторы групповой скорости отклоняются от направления $[100]$ к направлению $[110]$. Поэтому в направлении $[110]$ происходит фокусировка фононов, а в направлении $[100]$ – дефокусировка фононов в кристаллах CaF_2 для быстрой поперечной моды (см. Рис. 1.11). аналогично можно показать, что медленная поперечная мода в кристалле CaF_2 фокусируется в направлении $[111]$, а дефокусировка происходит в направлении $[100]$. Итак, мы показали, что направления фокусировки для поперечных мод в кристаллах Si соответствуют направлениям их дефокусировки в кристаллах CaF_2 .

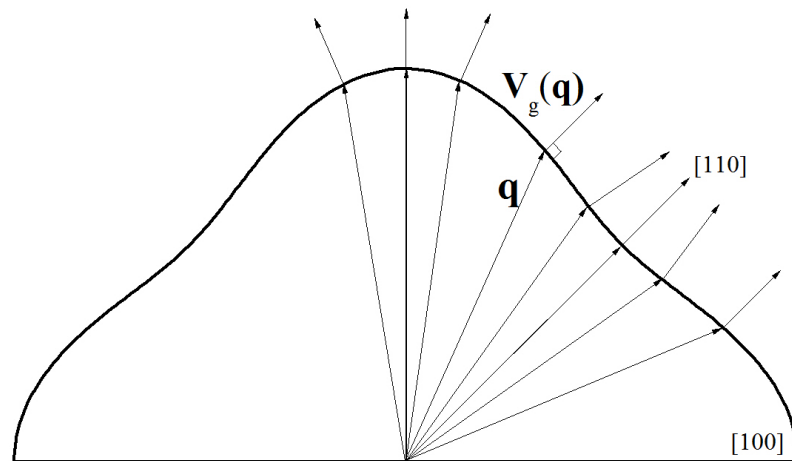


Рисунок 1.11. Иллюстрация фокусировки быстрой поперечной моды в CaF_2 . Изображено сечение поверхности медленности в модели анизотропного континуума плоскостью XZ в кристалле CaF_2 для быстрой поперечной моды. Стрелками изображены волновые вектора и соответствующие им групповые скорости фононов.

Рассмотрим фокусировку продольных мод в кристаллах Si и CaF_2 . Для этого построим сечения поверхности медленности диагональной плоскостью этих кристаллов для продольных

фононов в модели анизотропного континуума (см. Рисунок 1.12). Из начала координат отложим волновые векторы фононов \mathbf{q} до поверхности медленности, а в продолжении соответствующие им групповые скорости, перпендикулярные этим поверхностям. Как видно из рисунка 1.12 для кристалла Si векторы групповой скорости отклоняются от направления [100] и [110] к направлению [111], а для кристалла CaF₂ векторы групповой скорости отклоняются от направления [111] к направлению [100]. Поэтому фокусировка продольных фононов в кристаллах Si происходит в направлении [111], а дефокусировка – в направлении [100]. В кристаллах CaF₂ – наоборот: фокусировка продольных фононов происходит в направлении [100], а их дефокусировка – в направлении [111]. Таким образом, направления, соответствующие фокусировке фононов для кристаллов первого типа, являются направлениями дефокусировки фононов для кристаллов второго типа и наоборот.

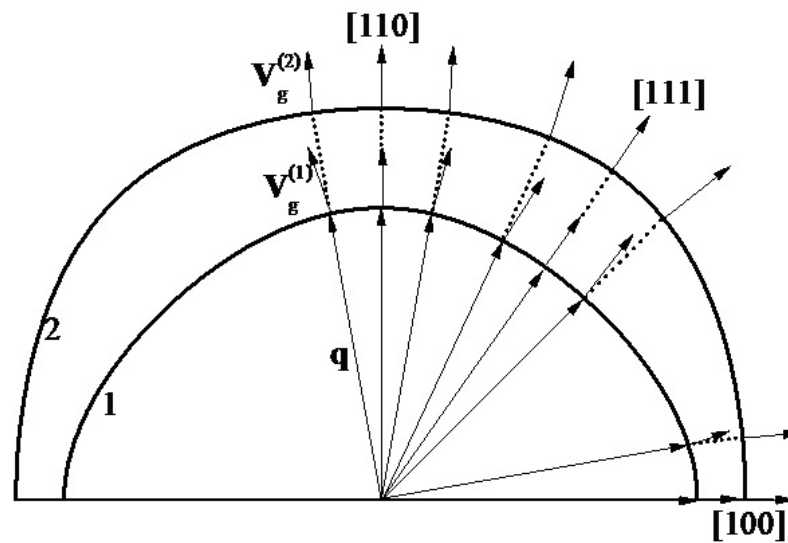


Рисунок 1.12. Иллюстрация фокусировки продольных мод в кристаллах Si и CaF₂. Изображены сечения поверхности медленности диагональной плоскостью в кристаллах Si (кривая 1) и CaF₂ (кривая 2) для продольной моды в модели анизотропного континуума. Стрелками изображены волновые вектора и соответствующие им групповые скорости фононов.

Из проведенного выше анализа следует, что можно предложить простой способ определения направлений фокусировки фононов, не привлекая сложных построений поверхностей медленностей и векторов групповых скоростей. Как видно из рисунков 1.10 - 1.12, направления фокусировки фононов совпадают с направлениями, в которых достигаются минимумы на поверхности медленности. Естественно, что эти направления соответствуют максимумам фазовых скоростей фононов (см., например, рис. 1.1). Поэтому для определения направлений фокусировки достаточно построить угловые зависимости $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ и определить направления, которые соответствуют максимальным значениям фазовых скоростей.

Итак, нами показано, что для кристаллов первого и второго типа не только спектр и вектора поляризации, но и эффект фокусировки фононов качественно отличаются.

Исследуем влияние дисперсии на изменение фокусировки фононов в кремнии. Проанализируем угловые зависимости фазовых скоростей $S^\lambda(x, \theta, 0)$ и компоненту групповой скорости фонона $S_\theta^\lambda(x, \theta, 0)$, которые определяет тангенс угла между направлениями групповой скорости

и волновым вектором для значений $x = 0.9$ для кристалла Si (см. рис. 1.8б,з). Рассмотрим случай волновых векторов в плоскости грани куба. Для продольных фононов при $x = 0.01$ в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_{\theta}^L(x, \theta, 0) > 0$, и они фокусируются в направлениях [101]. Тогда как при $x = 0.9$ величина $S_{\theta}^L(x, \theta, 0) < 0$, и направление фокусировки переходит в [001] (см. рис. 1.8б,з, кривая 1). Поскольку при этом $|S_{\theta}^L(x = 0.9)| > |S_{\theta}^L(x = 0.01)|$, то для $x = 0.9$ фокусировка продольных фононов в направлениях типа [001] значительно усиливается – увеличивается угол между векторами \mathbf{V}_g^L и \mathbf{q} . При изменении приведенного волнового вектора от $x = 0.01$ до $x = 0.9$ в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_{\theta}^{t_2}(x, \theta, 0) < 0$, и направление фокусировки для моды t_2 остается в направлении [100]. Однако при $x = 0.9$ спектр и медленность моды t_2 становятся почти изотропными (см. рис. 1.8б, 1.10б), поэтому $|S_{\theta}^{t_2}(x = 0.9)| \ll |S_{\theta}^{t_2}(x = 0.01)|$, и угол между векторами $\mathbf{V}_g^{t_2}$ и \mathbf{q} уменьшается, и эффект фокусировки для неё существенно уменьшается. Быстрая поперечная мода в длинноволновой области является почти изотропной и эффект фокусировки для неё слабо выражен. Однако при $x = 0.9$ ее анизотропия значительно возрастает (см. рис. 1.8б, кривая 2). При этом в интервале углов $0 \leq \theta \leq \pi/4$ величина $S_{\theta}^{t_1}(x, \theta, 0) > 0$, и мода t_1 фокусируется в направлениях типа [101] (см. рис. 1.8б,з кривая 2). Очевидно, что качественное изменение анизотропии спектра тепловых фононов и направлений фокусировки с увеличением волнового вектора должны приводить к изменению релаксационных характеристик фоновой системы и фононного транспорта в кубических кристаллах с повышением температуры.

В следующем разделе обсудим более подробно эффект фокусировки фононов и его влияние на угловое распределение плотности фононных состояний.

1.5 Коэффициент усиления потока фононов

Эффект фокусировки акустических фононов в кристаллах состоит в резкой анизотропии пространственного распределения потока энергии акустических волн в решетке. Он обусловлен упругой анизотропией кристаллов, которая приводит к неколлинеарности вектора групповой и фазовой скорости (волновым вектором \mathbf{q}). Фокусировка фононов ранее экспериментально исследовалась в опытах с высокочастотными акустическими фононами (10^{12} Гц), генерируемые путем прохождения кратковременных импульсов тока (10^7 Гц) через напыленную металлическую пленку на определенную площадку одной из грани исследуемого образца [55]. Фононные импульсы детектируют после прохождения через кристалл на противоположной грани. Детектирование приходящих фононов производилось путем измерения изменения электросопротивления сверхпроводящей пленки, которая находится вблизи температуры перехода из сверхпроводящего состояния. Измерения в работе [55] проводились на кристаллах KCl и LiF при температуре 2 – 3.6 К. Поскольку скорости продольных и поперечных мод имеют разную скорость, то фононные импульсы достигали детектора в различное время. Благодаря этому в этих экспериментах исследовались отдельные импульсы, соответствующие фононам различных поляризаций.

В эксперименте [55] фокусировка проявлялась в аномальном соотношении интенсивности продольных и поперечных фононных импульсов, распространяющихся в одном направлении.

Авторы [55] обнаружили, что амплитуды этих импульсов сильно зависят от направления распространения упругой волны и что в направлении [100] результаты для KCl значительно отличаются от результатов для LiF. Для образца из LiF, который относится к кристаллам первой группы (см. Таблицу 1.1), с осью вдоль [100] максимум пика интенсивности детектируемых тепловых импульсов связан с поперечными фононами. Однако для образцов из KCl, который относится к кристаллам второй группы (см. Таблицу 1.1), в том же направлении максимум интенсивности давали продольные фононы. Так, авторы [55] обнаружили, что для кристалла LiF в направлении [100] амплитуда импульса поперечных фононов в 100 раз больше амплитуды импульса продольных фононов. Для кристалла KCl, наоборот, амплитуда импульса поперечных фононов в 7 раз меньше амплитуды импульса продольных фононов. В направлении [110] в кристалле LiF амплитуда импульса быстрой поперечной моды превосходила амплитуды импульсов продольной и быстрой поперечной моды соответственно в 10 и 20 раз. Измерения в направлении [110] для кристалла KCl в работе [55] не проводились.

Для количественного описания эффекта фокусировки необходимо вычислить поток энергии фононов в заданном направлении. Для анализа плотности потока энергии фононов в заданном направлении волнового вектора \mathbf{q} и поляризации λ , Марис в работе [64] ввел понятие «enhancement factor» (в зарубежной литературе также известен как «amplification factor») A . Он равен отношению потока тепла данной поляризации в исследуемом кристалле к соответствующему потоку тепла в изотропной среде для выбранного направления. Итак, коэффициент A имеет смысл коэффициента усиления плотности состояний фононов для данного кристалла относительно изотропной среды. Для простоты далее мы будем его называть коэффициентом усиления.

Определим выражение для коэффициента усиления A [64]. Для этого рассмотрим детектор, установленный так, что его центр и источник фононов соединены вектором с направлением \mathbf{R} . Пусть детектор виден из точечного источника под телесным углом $\Delta\Omega_d$. Для изотропной среды волны, покидающие источник с волновыми векторами, лежащими в телесном угле $\Delta\Omega_d$ в окрестности направления \mathbf{R} , будут достигать детектора. В случае анизотропной среды, чтобы волна с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ достигла центра детектора, необходимо выполнения условия

$$V_g^\lambda \parallel \mathbf{R}. \quad (1.43)$$

Рассмотрим волну (\mathbf{q}, λ) , удовлетворяющую условию (1.43). Тогда волны с той же поляризацией и с волновыми векторами, лежащими в телесном угле $\Delta\Omega_q$, тоже будут достигать детектора. По сравнению с изотропной средой, в анизотропной среде телесный угол в \mathbf{q} -пространстве содержит волны, которые достигают детектора больше на коэффициент

$$A = \frac{\Delta\Omega_q}{\Delta\Omega_d}. \quad (1.44)$$

Поэтому, если распределение волновых векторов изотропно, то импульс фононов будет увеличиваться на коэффициент A по отношению к изотропной среде. Задача сводится к вычислению

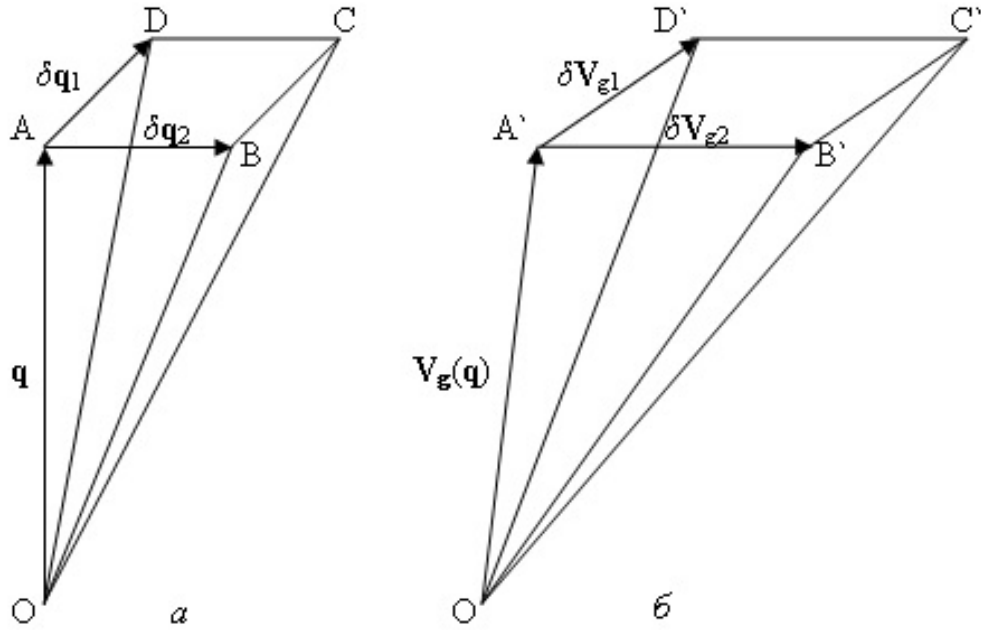


Рисунок 1.13. Схематичное изображение телесных углов: (а) - $\delta\Omega_q$ в \mathbf{q} -пространстве и (б) - $\delta\Omega_V$ в пространстве групповых скоростей.

отношения телесного угла в \mathbf{q} -пространстве к телесному углу в пространстве групповых скоростей. Рассмотрим два ортогональных единичных вектора e_θ и e_φ , ортогональные вектору \mathbf{q} . Определим бесконечно малый телесный угол $\delta\Omega_q$ в \mathbf{q} -пространстве как угол, стягивающий параллелограмм $ABCD$ из точки O (см. рис. 1.13а), определим $\delta\mathbf{q}_1 = \delta q e_\theta$ и $\delta\mathbf{q}_2 = \delta q e_\varphi$ ($\mathbf{q} = q\mathbf{n}$, $\delta q \ll q$). Тогда

$$\delta\Omega_q = (\delta q/q)^2. \quad (1.45)$$

Соответствующий телесный угол в пространстве групповых скоростей $\delta\Omega_V$ есть угол, образующий параллелограмм $A'B'C'D'$ (см. рис. 1.13б), где

$$\delta V_{g1i} = V_{gi}(\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}_1) - V_{gi}(\mathbf{q}) = \frac{\partial V_{gi}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \delta\mathbf{q}_1 = \frac{\partial V_{gi}}{\partial \theta} \cdot \frac{\delta q}{q}. \quad (i = x, y, z) \quad (1.46)$$

Аналогично

$$\delta V_{g2i} = V_{gi}(\mathbf{q} + \delta\mathbf{q}_2) - V_{gi}(\mathbf{q}) = \frac{\partial V_{gi}}{\partial \varphi} \cdot \frac{\delta q}{q \sin \theta}. \quad (i = x, y, z) \quad (1.47)$$

В общем случае площадка $\delta\mathbf{S}_V$, образованная векторами $\delta\mathbf{V}_{g1}$ и $\delta\mathbf{V}_{g2}$, не ортогональна вектору групповой скорости \mathbf{V}_g . Поэтому ее необходимо спроецировать на единичный вектор, направленный вдоль групповой скорости: $\delta S_V^{\parallel} = \delta\mathbf{S}_V \cdot \mathbf{V}_g/V_g$. Тогда телесный угол в пространстве групповых скоростей \mathbf{V}_g запишется в виде

$$\delta\Omega_V = \frac{\delta S_V^{\parallel}}{V_g^2} = \left| \frac{\delta\mathbf{S}_V \cdot \mathbf{V}_g}{V_g^3} \right|, \quad (1.48)$$

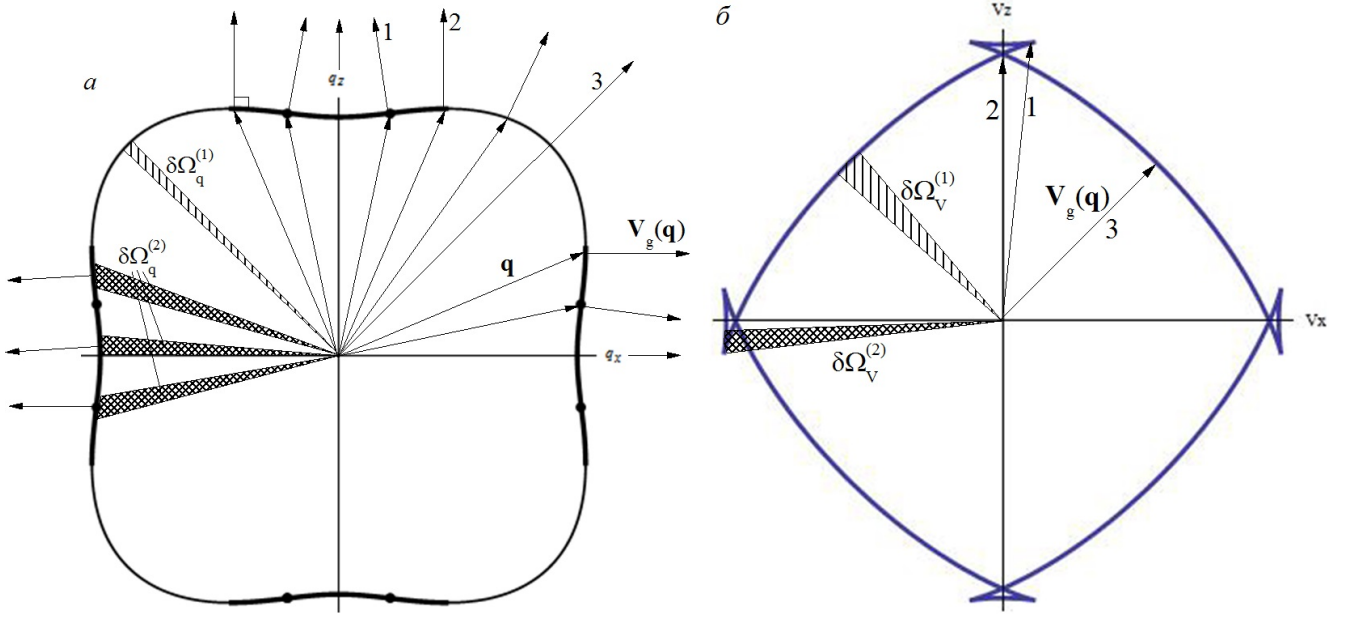


Рисунок 1.14. Сечения плоскостью грани куба поверхности медленности (а) и поверхности групповой скорости (б) для медленной поперечной моды в кристалле кремния. Векторы групповых скоростей 1,2,3 на рисунке (б) соответствуют векторам 1,2,3 на рисунке (а).

где

$$\delta \mathbf{S}_V = \delta \mathbf{V}_{g1} \times \delta \mathbf{V}_{g2} = \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\delta q}{q} \right)^2 \times \left[\left(\frac{\partial V_{gy}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gz}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}}{\partial \varphi} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial V_{gz}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gx}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}}{\partial \varphi} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial V_{gx}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gy}}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}}{\partial \varphi} \right) \mathbf{k} \right],$$

$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – единичные векторы вдоль осей X, Y, Z, компоненты групповой скорости фононов с поляризацией λ ($V_{gx}^\lambda(\theta, \varphi), V_{gy}^\lambda(\theta, \varphi), V_{gz}^\lambda(\theta, \varphi)$) в декартовой системе координат определены формулами (1.38) при $x \rightarrow 0$. Тогда коэффициент усиления A (1.44) данной поляризации λ в заданном направлении волнового вектора \mathbf{q} имеет вид

$$(A^\lambda(\theta, \varphi))^{-1} = \frac{\delta \Omega_V^\lambda}{\delta \Omega_q} = \frac{1}{(V_g^\lambda)^3 \sin \theta} \left| \left(\frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gx}^\lambda + \left(\frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gz}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gy}^\lambda + \left(\frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \varphi} - \frac{\partial V_{gy}^\lambda}{\partial \theta} \frac{\partial V_{gx}^\lambda}{\partial \varphi} \right) V_{gz}^\lambda \right|, \quad (1.49)$$

В модели изотропной среды коэффициент усиления $A^t = A^L = 1$.

Спектр упругих волн и групповые скорости реальных кристаллов имеют достаточно сложный вид. Чтобы наглядно представить телесный угол $\delta \Omega_q$ в \mathbf{q} -пространстве и соответствующий ему телесный угол $\delta \Omega_V$ в пространстве групповых скоростей, обратимся к рис. 1.14. На нем изображены сечения плоскостью грани куба поверхности медленности (рис. 1.14а) и поверхности групповой скорости (рис. 1.14б) для медленной поперечной моды в кристалле кремния. В окрестности направления [110] телесный угол $\delta \Omega_V^{(1)}$ (см. рис. 1.14б) соответствует $\delta \Omega_q^{(1)}$ (см. рис. 1.14а), причем $\delta \Omega_V^{(1)} > \delta \Omega_q^{(1)}$. В этом случае коэффициент усиления (1.44) будет меньше

единицы, т.е. в направлении [110] происходит дефокусировка медленной поперечной моды. В окрестности направления [100] телесный угол $\delta\Omega_V^{(2)}$ (см. рис. 1.14б) соответствует трем различным значениям телесного угла $\delta\Omega_q^{(2)}$ (см. рис. 1.14а). Поэтому полное отношение $\delta\Omega_q/\delta\Omega_V$ для направления [100] будет гораздо больше единицы, что указывает на большое усиление потока фононов в окрестности этого направления.

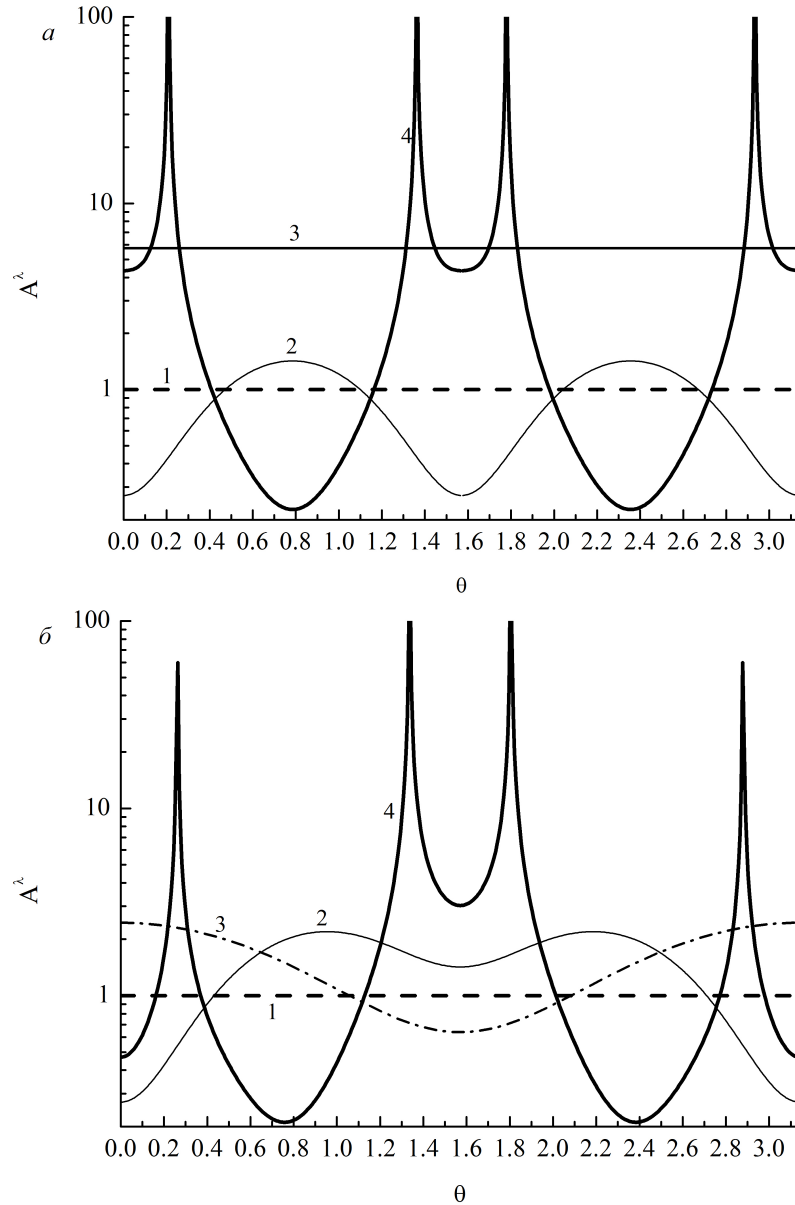


Рисунок 1.15. Угловые зависимости коэффициента усиления A^λ в кристалле кремния. (а) - в плоскости грани куба и (б) в диагональной плоскости. Линия 1 соответствуют модели изотропной среды. Кривые 2 – для продольных фононов, кривые 3 – для поперечной моды t_1 , кривые 4 – для поперечной моды t_2 .

Рассмотрим более подробно поверхность медленности для моды t_2 . В разделе 1.3 указывалось, что в окрестности направления [100] при углах $\theta \in [0, 0.41]$ $\theta_g^{t_2} < 0$, и при $\theta_0 = 0.21 \theta_g^{t_2}$ имеет локальный минимум. Для этого же угла (θ_0) вектор групповой скорости «1» на рисунке 1.14б указывает на границу складки на поверхности групповой скорости. При этом же угле (θ_0) кривизна поверхности медленности обращается в ноль. Положения нулевой кривизны

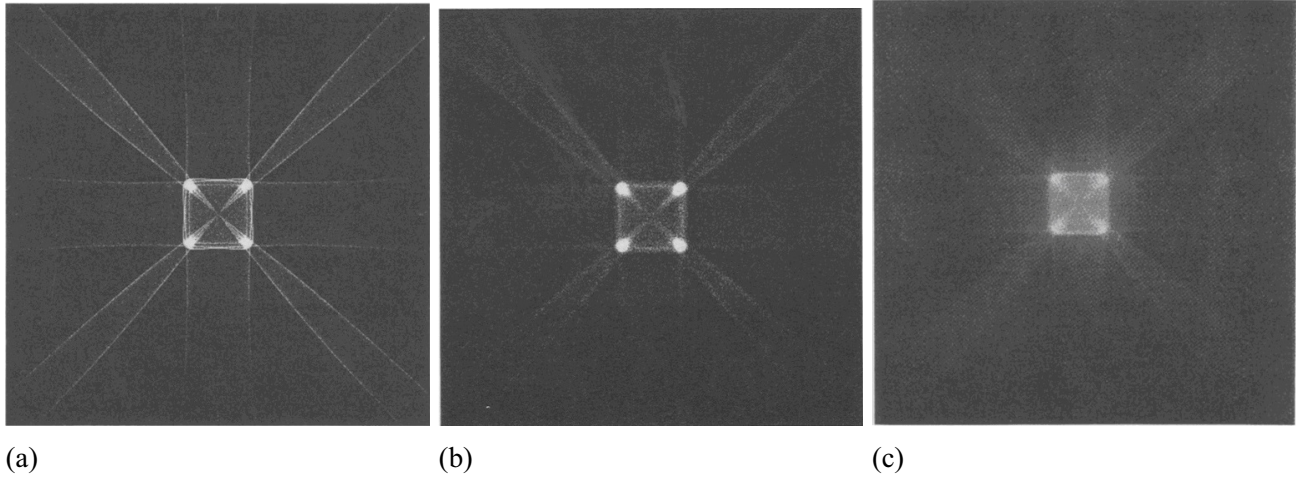


Рисунок 1.16. Результаты расчета картины фокусировки энергии фононов в плоскости $\{100\}$ для кристалла GaAs для точечного источника с размерами детектора: (a) $2^{-8} \times 2^{-8} \text{ мм}^2$ и (b) $2^{-6} \times 2^{-6} \text{ мм}^2$. (c) – экспериментальная картина фокусировки энергии фононов, полученная в работе [65].

обозначены точками на рисунке 1.14a. Именно в этих точках кривизна поверхности медленно-сти меняет знак, и происходит переход от выпуклой к вогнутой области. В трехмерном случае множество этих точек образуют линии нулевой кривизны. Поскольку фононный поток ортогонален поверхности медленности и обратно пропорционален кривизне этой поверхности в данной точке [20, 54, 55], то точки нулевой кривизны математически соответствуют бесконечному потоку фононов от точечного источника тепла вдоль соответствующего направления групповой скорости.

Рассмотрим угловые зависимости коэффициента усиления A^λ (1.49) в кристалле кремния (см. рис. 1.15). В областях, где $A^\lambda > 1$ имеет место фокусировка фононов, где $A^\lambda < 1$ – дефокусировка фононов. Случай $A = 1$ соответствует модели изотропной среды, в которой направление потока тепла совпадает с направлением волнового вектора фонона. Как и следовало ожидать, для поперечной моды t_2 коэффициент усиления расходится вблизи направлений $[100]$ в точках нулевой кривизны поверхности медленности (см. рис. 1.15, кривые 3). Минимальное значение $A_{\min}^{t_2}(\theta = 0.75, \varphi = \pi/4) = 0.21$ (см. рис. 1.15б, кривая 3). Коэффициент усиления для поперечной моды t_1 в плоскости грани куба принимает постоянное и максимальное значение равное 5.74 (см. рис. 1.15a, кривая 2), а минимальное значение A^{t_1} принимает в диагональной плоскости при $\theta = \pi/2$ равное 0.64 (см. рис. 1.15б, кривая 2). Для продольных фононов в направлении $[100]$ происходит дефокусировка, и $A^L = 0.27$. В направлении $[110]$ имеет место локальная фокусировка, и $A^L = 1.42$, а в направлении $[111]$ – фокусировка продольных фононов, и $A^L = 2.20$ (см. рис. 1.15, кривые 1).

Марис [64] отметил, что для поперечных фононов в направлении $[100]$ коэффициент усиления однозначно не определен. Чтобы решить эту проблему, он усреднил фононный поток по детектору в виде круга. Для кристалла Si он получил $A_{[100]}^t = 3.12$. В 1980 году Лакс обобщил метод Мариса на случай прямоугольного детектора. Однако такой подход не решает проблему расходимости A^{t_2} в точках нулевой кривизны поверхности медленности, поскольку усреднение проводится в малой окрестности направления $[100]$.

При расчете плотности потока фононов в заданном направлении в кристалле авторы работы [66] смогли обойти проблему расходимости коэффициента усиления. Для этого они усреднили плотность потока по площадке детектора ΔS для произвольного направления в кристалле. Для детектора в виде квадрата $2^{-8} \times 2^{-8}$ и $2^{-6} \times 2^{-6}$ мм² они рассчитали плотность потока фононов в плоскости {100} для кристалла GaAs и получили хорошее согласие с экспериментом [65] (см. рис. 1.16).

1.6 Выводы

1. Анализ динамических характеристик упругих волн в кубических кристаллах с различным типом упругой энергии показал, что все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной и отрицательной анизотропией упругих модулей второго порядка. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов первого и второго типа качественно отличается.
2. Предложен метод аппроксимации фононного спектра кубических кристаллов, полученного из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений, на всю зону Бриллюэна в виде, позволяющем исследовать релаксационные характеристики фононных систем. Он заключается в использовании степенного разложения по приведенному волновому вектору фононов для симметричных направлений и разложения по кубическим гармоникам для экстраполяции спектра на всю зону Бриллюэна. Расчет теплоемкости кристаллов Si и Ge показал, что предложенная аппроксимация спектра удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными и может быть использована при анализе релаксационных характеристик фононных систем.
3. Теоретический анализ распространения упругих волн в кубических кристаллах при низких температурах показал, что в кристаллах с различным типом анизотропии упругой энергии не только спектр и вектора поляризации, но и фокусировка фононов качественно отличаются. Направления фокусировки фононов в кристаллах первого типа соответствуют направлениям дефокусировки фононов в кристаллах второго типа и наоборот.
4. Показано, что изменение анизотропии спектра фононов при переходе от длинноволновых фононов к коротковолновым приводит к изменению направлений фокусировки для различных ветвей спектра фононов в кристаллах Si.

Глава 2

Времена релаксации при диффузном рассеянии фононов на границах образца

В настоящей главе рассмотрим влияние фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа при диффузном рассеянии фононов на границах монокристаллических образцов в рамках теории Казимира – МакКарди [14, 17]. Казимир [14] вычислил теплопроводность диэлектрического стержня бесконечной длины в модели изотропной среды в предположении, что все фононы при соударении с поверхностью поглощаются, а затем переизлучаются изотропно в полупространство по направлению внутрь образца с интенсивностью, которая зависит от температуры поверхности в соответствии с теорией излучения абсолютно черного тела. Теория Казимира [14] была обобщена на случай упруго анизотропных кристаллов в [17], где к предположению Казимира были добавлены ещё два:

1. поток тепла и распределение температур однородно по длине образца;
2. предполагается наличие плоскости зеркальной симметрии перпендикулярной оси образца.

Последнее предположение о наличии плоскости зеркальной симметрии не является критичным. Дело в том, что плоскость, перпендикулярная направлению [111], не является плоскостью зеркальной симметрии. Однако для этого направления рассчитанные значения длин пробега фононов согласуются с экспериментальными данными с той же погрешностью, как и для других направлений [17].

Однако, авторы [17] не получили аналитических выражений для времен релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины. Поэтому в настоящей главе в рамках теории Казимира – МакКарди [14, 17] с учетом фокусировки фононов рассмотрим кнудсеновское течение фононного газа в образцах конечной длины и определим времена релаксации фононов.

В разделе 2.1 получены выражения для времен релаксации и длин свободного пробега при диффузном рассеянии фононов на границах образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. В разделе 2.2 рассчитаны времена релаксации фононов на границах и длины свободного пробега фононов для образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. В разделе 2.3 проведен анализ анизотропии фононного транспорта

в объемных образцах кремния с круглым, квадратным и прямоугольным поперечным сечениями в режиме граничного рассеяния. Для образцов с квадратным сечением установлена связь между направлениями фокусировки фононов и максимальными значениями длин пробега фононов. Для образцов с прямоугольным сечением проанализирована анизотропия длин свободного пробега фононов в зависимости от ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла. Материал этой главы основан на результатах, полученных в работах [28,29].

2.1 Времена релаксации и длины свободного пробега для кнудсеновского течения фононного газа в образцах бесконечной длины

В рамках теории Казимира – МакКарди [14, 17] рассмотрим фононный транспорт в образцах бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определим времена релаксации фононов. Выберем направление градиента температуры вдоль оси образца и обозначим это направление X_3 . Проведем сечение образца плоскостью, перпендикулярной оси X_3 и проходящей через точку $X_3 = 0$ (см. Рис. 2.1). Рассмотрим элемент поверхности dS в окрестности точки с координатами (X_1, X_3) . Обозначим через $\mathbf{m}(X_1)$ единичный вектор, перпендикулярный поверхности образца и направленный внутрь его. Поток фононов с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ , покидающих этот элемент поверхности равен $(\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) N_q^{(0)\lambda}(X_3, \mathbf{q})dS$, где \mathbf{V}_g^λ – групповая скорость фононов, а $N_q^{(0)\lambda}(X_3, \mathbf{q})$ – функция распределения Планка, соответствующая температуре T рассматриваемого элемента:

$$N_q^{(0)\lambda}(X_3, \mathbf{q}) = \left(\exp \left[\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}}{k_B T(X_3)} \right] - 1 \right)^{-1}.$$

Фононы, покидающие элемент поверхности dS , будут распространяться вдоль стержня, пока не столкнутся с поверхностью. Предполагая, что распределение температур и потока тепла однородно по образцу, авторы [17] подсчитали поток тепла, протекающий через плоскость $X_3 = 0$ слева направо и справа налево, и получили следующее выражение для теплопроводности $\kappa_\infty(T)$:

$$\kappa_\infty(T) = \frac{1}{2S_C} \sum_{\lambda, \mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda} \frac{dN_q^{(0)\lambda}}{dT} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) (\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}))^2 = \sum_{\lambda, \mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda} \frac{dN_q^{(0)\lambda}}{dT} I_\infty^\lambda, \quad (2.1)$$

$$I_\infty^\lambda = \frac{1}{2S_C} \int_{X_1} (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) (\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}))^2 dX_1, \quad (2.2)$$

где S_C – площадь поперечного сечения образца, а $\Lambda_3^\lambda(X_1, q)$ - проекция длины пробега фонона с импульсом \mathbf{q} и поляризацией λ на направление градиента температуры.

Рассмотрим вычисление интеграла по контуру X_1 (см. рис. 2.2) для цилиндрических образцов бесконечной длины. На рисунке 2.3 показано сечение цилиндра плоскостью перпендикулярной

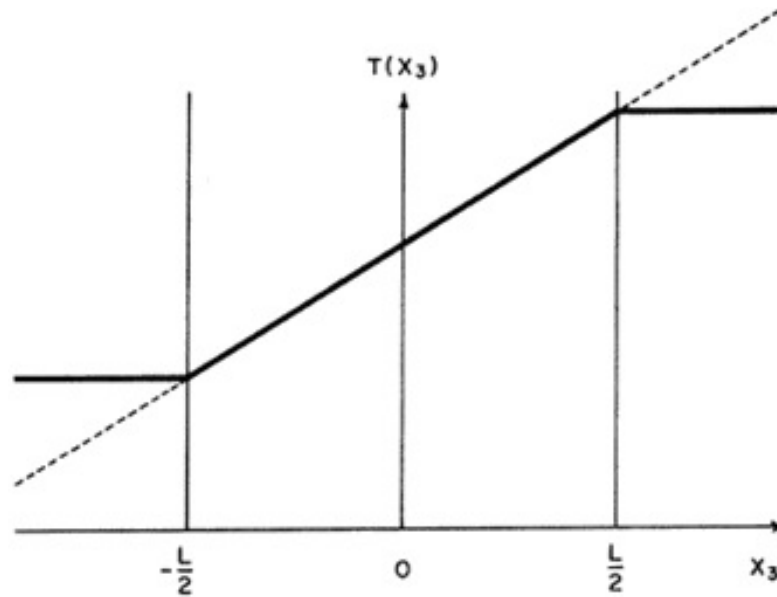


Рисунок 2.1. Распределение температуры в образце длины L (сплошная линия) и в бесконечном образце (пунктирная линия). Рисунок взят из работы [17].

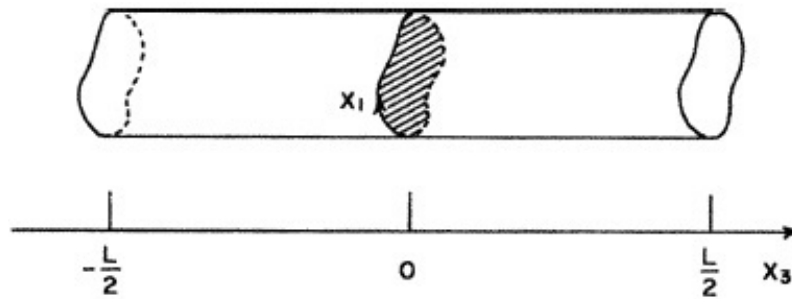


Рисунок 2.2. Схематичное изображение образца длины L с произвольным поперечным сечением. Рисунок взят из работы [17].

его оси. Радиус цилиндра обозначим через R . Фонон покидает элемент поверхности в точке X_1 в направлении вектора групповой скорости \mathbf{V}_g^λ . Проекция этого вектора на секущую плоскость есть величина $V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}$, где V_{g3}^λ - проекция групповой скорости на ось цилиндра. Проекцию длины свободного пробега фононов на плоскость сечения обозначим $\Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q})$. На рисунке 2.3 она равна длине отрезка X_1A . Проекция длины свободного пробега на ось стержня $\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ связана с $\Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q})$ соотношением:

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} \Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q}), \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_{g1}^\lambda)^2 + (V_{g2}^\lambda)^2}. \quad (2.3)$$

Введем угол γ_1 между осью Y и нормалью к окружности $\mathbf{m}(X_1)$ в точке X_1 , а также угол ϕ между вектором $\mathbf{V}_{g\perp}^\lambda$ и осью Y . Из геометрии рисунка следует, что $\Lambda_\perp^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = 2R \cos(\phi - \gamma_1)$, тогда

$$\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q}) = \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} 2R \cos(\phi - \gamma_1), \quad (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) = V_{g\perp}^\lambda \cos(\phi - \gamma_1) \quad (2.4)$$

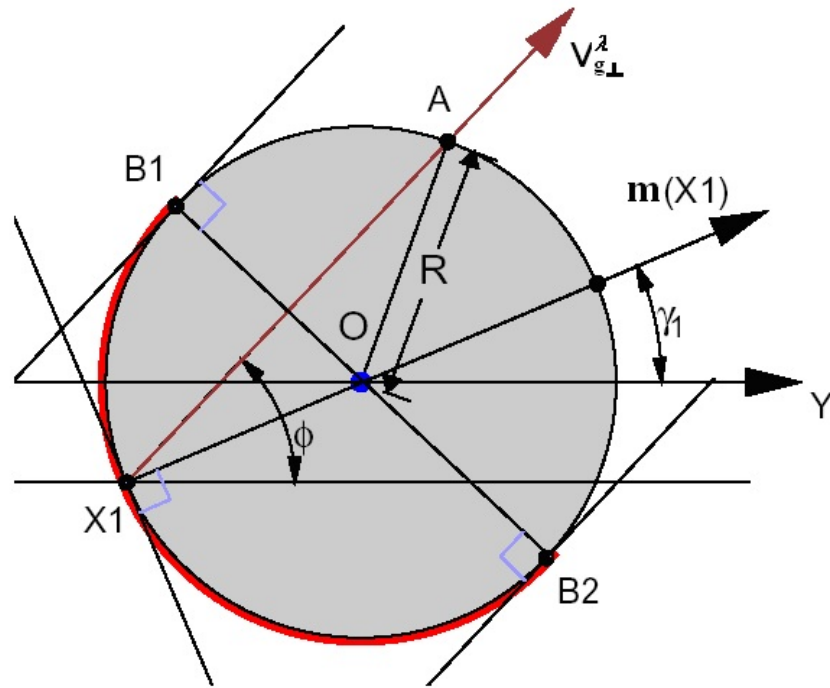


Рисунок 2.3. Схема, иллюстрирующая вычисление контурного интеграла для цилиндрических образцов (показано сечение цилиндра плоскостью, перпендикулярной его оси).

Для образца с круглым сечением полагаем $dX_1 = R d\gamma_1$. Вклад в контурный интеграл (A1) дают только фононы, отраженные элементом поверхности по направлению внутрь образца. Поэтому для заданного угла ϕ интегрируем по углам γ_1 только в пределах сектора между точками $B1$ и $B2$ (сектор выделен жирной линией на рисунке). Итак, из физического анализа задачи следует, что контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему контуру, как это указано в [17], а должны охватывать только половину контура. Поэтому область интегрирования X_1 и соответствующие значения углов γ_1 для бесконечного образца ограничены значениями $-\pi/2 < \gamma_1 - \phi < \pi/2$ (см. рис. 2.3). Для бесконечного образца с круглым сечением без труда находим релаксационную функцию

$$I_\infty^\lambda = \frac{4R^3}{2S_C} \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{V_{g\perp}^\lambda} \int_{X_1} \cos^3(\phi - \gamma_1) d\gamma_1 = \frac{8R}{3\pi} \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{V_{g\perp}^\lambda}. \quad (2.5)$$

Выражение (2.5) совпадает с полученным в работе [17].

Теперь рассмотрим стержень бесконечной длины с прямоугольным сечением $D \times \mu D$ (см. рис 2.4). Пусть V_{g3}^λ - проекция групповой скорости на направление градиента температуры, которое совпадает с осью стержня, $V_{g\perp}^\lambda$ - проекция групповой скорости на плоскость сечения стержня, а V_{g1}^λ и V_{g2}^λ - проекции групповой скорости на боковые грани образца. На рисунке 2.4 изображена ситуация, когда $\text{tg } \phi = |V_{g2}^\lambda| / |V_{g1}^\lambda| < \mu$. При вычислении интеграла по контуру выделим три области «А», «В» и «С» (см. рис. 2.4): область «А» – это треугольник с вершинами ODF, область «В» – параллелограмм OFHG и область «С» – треугольник GH(μD). Как и в случае образцов с круглым сечением, контурные интегралы по dX_1 вычисляются не по всему прямоугольному контуру, а захватывают только половину его. Дело в том, что при диффузном рассеянии фонона на границе для фиксированного угла ϕ мы должны интегрировать только по тем сторонам

формулы (2.9) и (2.10) совпадают с полученными в работе [17]. Для того, чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (2.9), (2.10) положить $\mu = 1$. Итак, предложенный нами метод расчета релаксационных функций $I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$ для образцов бесконечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями приводит к таким же результатам, что и в работе [17]. Далее мы покажем, что наш метод позволяет также аналитически решить задачу о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины.

Из сравнения формулы (2.1) со стандартным выражением теплопроводности [35, 67] в приближении времени релаксации τ^λ :

$$\kappa(T) = k_B \sum_{q,\lambda} \tau^\lambda(q) (V_{g3}^\lambda)^2 \left(\frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T} \right)^2 N_q^{(0)\lambda} (N_q^{(0)\lambda} + 1) \quad (2.11)$$

можно определить время релаксации фононов на границах для бесконечных образцов следующим образом:

$$\tau_{B\infty}^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)}{(V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2}. \quad (2.12)$$

Из формул (2.5), (2.9) и (2.10) для бесконечных образцов с круглым и прямоугольным сечениями, соответственно, имеем:

$$\tau_{B\infty}^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{8R}{3\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}}, \quad (2.13)$$

$$\tau_{B\infty}^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{D}{6\mu} \frac{(3\mu |V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)}{(V_{g1}^\lambda)^2}, & \text{если } |V_{g2}| < \mu |V_{g1}|; \\ \mu \frac{D}{6} \frac{(3|V_{g2}^\lambda| - \mu |V_{g1}^\lambda|)}{(V_{g2}^\lambda)^2}, & \text{если } |V_{g2}| > \mu |V_{g1}|. \end{cases} \quad (2.14)$$

Выражение (2.13) для времени релаксации фононов на границах бесконечных образцов с круглым сечением совпадает с полученным ранее выражением в работе [68]. В то время как выражение (2.14) получено впервые.

Определим среднюю длину свободного пробега фононов Λ_∞ при диффузном рассеянии на границах для образцов бесконечной длины. Рассмотрим область температур, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Используем известное выражение кинетической теории газов для теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \Lambda_\infty. \quad (2.15)$$

В формуле (2.1) для теплопроводности выделим теплоемкость единицы объема C_V :

$$C_V = \frac{2\pi^2 k_B^4}{5\hbar^3} T^3 \frac{1}{3} \sum_\lambda \langle (S_0^\lambda)^{-3} \rangle \quad (2.16)$$

и среднюю скорость фононов \bar{S} :

$$\bar{S} = \sum_{\lambda} \langle (S_0^{\lambda})^{-2} \rangle \left\{ \sum_{\lambda} \langle (S_0^{\lambda})^{-3} \rangle \right\}^{-1}, \quad (2.17)$$

где $\langle (S_0^{\lambda})^{-3} \rangle = \int d\Omega_q (S_0^{\lambda})^{-3} / 4\pi$ и $\langle (S_0^{\lambda})^{-2} \rangle = \int d\Omega_q (S_0^{\lambda})^{-2} / 4\pi$. Средние скорости фононов и теплоемкость для кристаллов кремния приведены в таблице 2.1 Тогда выражение для теплопроводности κ_{∞} может быть представлено в виде:

$$\kappa_{\infty}(T) = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \frac{3}{4\pi} \cdot \left[\sum_{\lambda_1} \langle (S_0^{\lambda_1})^{-2} \rangle \right]^{-1} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^3} = \frac{1}{3} C_V \bar{S} \Lambda_{\infty}, \quad (2.18)$$

где средняя длина пробега $\Lambda_{B\infty}$ будет определяться выражением

$$\Lambda_{B\infty} = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda_1} \langle (S_0^{\lambda_1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_{\infty}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{(S_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^3}. \quad (2.19)$$

Таблица 2.1. Значения параметров, определяющих длины свободного пробега фононов для кристаллов кремния при низких температурах.

мода	$\langle (S_0^{\lambda}(\theta, \varphi))^{-2} \rangle$, $10^{-12} (\text{с}^2 \text{ см}^{-2})$	\bar{S}^{λ} , $10^5 (\text{см с}^{-1})$	C_V^{λ}/T^3 , эрг $\text{см}^{-3} \text{К}^{-4}$	\bar{S} , $10^5 (\text{см с}^{-1})$	C_V/T^3 , эрг $\text{см}^{-3} \text{К}^{-4}$
L	1.21	9.07	0.55	5.67	5.88
T1	3.08	5.69	2.21		
T2	3.87	5.06	3.21		

Как видно из выражения (2.18), в дебаевском приближении теплопроводность пропорциональна теплоемкости и при низких температурах следует зависимости T^3 - в соответствии с законом Дебая. Этот результат привлек внимание исследователей к теории Казимира [14] (Заметим, что формула для теплопроводности в работе [14] содержит известную ошибку – лишний множитель $\pi/2$). Следует отметить, что для модели изотропной среды из выражения (2.19) следует результат Казимира: для цилиндрического стержня бесконечной длины $\Lambda_{\infty} = 2R$. Аналогичным образом можно определить средние длины свободного пробега фононов для каждой из ветвей фононного спектра. Для этого представим теплопроводность в виде аддитивной суммы от всех колебательных ветвей

$$\kappa_{\infty}(T) = \sum_{\lambda} \kappa_{\infty}^{\lambda}(T) = \sum_{\lambda} \frac{1}{3} C_V^{\lambda} \bar{S}^{\lambda} \Lambda_{\infty}^{\lambda}. \quad (2.20)$$

Тогда средняя длина свободного пробега Λ_∞^λ для фононов ветви λ может быть представлена в виде:

$$\Lambda_\infty^\lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S_0^\lambda)^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}. \quad (2.21)$$

Для образцов с круглым сечением в качестве I_∞^λ надо взять выражение (2.5), а для образцов с прямоугольным сечением - (2.9) и (2.10). Итак, длины свободного пробега фононов при низких температурах для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума выражаются через двукратный угловой интеграл.

2.2 Времена релаксации и длины свободного пробега для кнудсеновского течения фононного газа в образцах конечной длины

Рассмотрим фононный транспорт в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями в рамках теории МакКарди и др. [17]. В этой теории предполагалось, что вклад в теплопроводность образцов конечной длины вносят только те фононы, которые столкнутся с поверхностью образца в пределах его длины. А те фононы, которые столкнулись бы с поверхностью образца за пределами его длины, не вносят вклад в теплопроводность. Для этих фононов проекция длины пробега на ось X_3 определяется неравенством

$$|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq \frac{L}{2}. \quad (2.22)$$

Обозначим вклад этих фононов в теплопроводность $\Delta\kappa(T)$. Тогда теплопроводность стержня конечной длины L равна теплопроводности бесконечного стержня за вычетом $\Delta\kappa(T)$:

$$\kappa(T) = \kappa_\infty(T) - \Delta\kappa(T). \quad (2.23)$$

Причем, поправка $\Delta\kappa(T)$ имеет вид [17]:

$$\Delta\kappa(T) = \sum_{\lambda, q}^* \hbar\omega_q^\lambda \frac{dN_{q\lambda}^{(0)}}{dT} \cdot \frac{1}{2S_C} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) \left\{ |\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| - \frac{L}{2} \right\}^2 = \sum_{\lambda, q}^* \hbar\omega_q^\lambda \frac{dN_q^{(0)\lambda}}{dT} \Delta I^\lambda, \quad (2.24)$$

$$\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{1}{2S_C} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1)\mathbf{V}_g^\lambda) \left\{ |\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| - \frac{L}{2} \right\}^2. \quad (2.25)$$

Звездочка у знака суммирования по волновым векторам в формуле (2.24) означает, что в поправку $\Delta\kappa(T)$ вносят вклад только те фононы, для которых выполняется неравенство (2.22). При вычислении интеграла по контуру X_1 мы также должны учитывать неравенство (2.22). Выраже-

ние (2.23) для образцов конечной длины можно представить в виде:

$$\kappa(T) = \sum_{\lambda, q}^* \hbar \omega_q^\lambda \frac{dN_q^{(0)\lambda}}{dT} I^\lambda(\theta, \varphi), \quad I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi). \quad (2.26)$$

Неравенство (2.22) накладывает ограничения на область интегрирования по волновым векторам в выражении для поправки к теплопроводности. Поэтому непосредственным образом ввести времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образцов в методе, предложенном в [17], не представляется возможным. К сожалению, авторам [17] не удалось получить аналитических выражений для величин $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$. Расчет теплопроводности для кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния был выполнен численным методом только для симметричных направлений при температуре 3 К.

Отметим, что для расчета температурных зависимостей теплопроводности в рамках релаксационного метода, прежде всего, необходимо определить времена релаксации фононов для всех актуальных процессов рассеяния (включая рассеяние фононов на поверхности образца) и найти полное время релаксации согласно правилу Маттиссена. Это позволит исследовать изменение вкладов различных колебательных мод в теплопроводность с ростом температуры, а также проанализировать угловые зависимости релаксационных параметров в зависимости от ориентаций градиента температуры относительно осей кристалла, не ограничиваясь моделью анизотропного континуума. Поскольку во всем интервале температур ниже максимума теплопроводности доминирует граничное рассеяние фононов, то пренебрежение эффектом фокусировки может привести к значительной погрешности при интерпретации экспериментальных данных для всех упруго анизотропных кристаллов.

В виду отсутствия аналитических расчетов времен релаксации за последние сорок лет со времени опубликования работы [17] не было опубликовано ни одной работы, в которой бы анализировались температурные зависимости теплопроводности диэлектрических кристаллов с учетом фокусировки фононов. В связи с этим, представим некоторые детали расчета релаксационных функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями.

Для цилиндрического образца длины L при вычислении контурного интеграла

$$\Delta I^\lambda = \frac{1}{2S_C} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^\lambda) \left\{ |\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| - \frac{L}{2} \right\}^2 \quad (2.27)$$

мы должны учесть условие (2.22) $|\Lambda_3^\lambda(X_1, q)| \geq L/2$. Подставляя выражение (2.4) в это неравенство, получаем:

$$\Delta^\lambda = \frac{L}{4R} \frac{V_{g\perp}^\lambda}{|V_{g3}^\lambda|} < 1. \quad (2.28)$$

Вычисление интеграла (2.27) с условием (2.28) проводится аналогично рассмотренному ранее случаю образцов бесконечной длины (см. рис 2.3) и дает следующий результат:

$$\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{3}{2} I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) \times \left[\left(1 + (\Delta^\lambda)^2\right) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2}\right)^3 - \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2}\right) \right]. \quad (2.29)$$

При выполнении противоположного неравенства $\Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1$ величина $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$ и величина $I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$.

Теперь вычислим интеграл по контуру для образцов длины L с прямоугольным поперечным сечением $D \times \mu D$

$$\Delta I^\lambda = \frac{1}{2S_C} \int_{X_1} dX_1 (\mathbf{m}(X_1) \mathbf{V}_g^\lambda) \left\{ |\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| - \frac{L}{2} \right\}^2 \text{ при } |\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq \frac{L}{2}. \quad (2.30)$$

Отметим, что контурные интегралы по dX_1 в формулах (2.27) и (2.30) вычисляются не по всему прямоугольному контуру, а захватывают только половину его, как и для образцов бесконечной длины. Рассматривая область «А» (см. Рис. 2.4, треугольник ODF), из неравенства $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq L/2$ можно получить ограничение на область интегрирования:

$$0 \leq x \leq x_{\max}, \quad x_{\max} = D - \frac{L}{2} \cdot \frac{V_{g\perp}^\lambda \cos \phi}{V_{g3}^\lambda} = D \left(1 - k_0 \cdot \frac{V_{g1}^\lambda}{V_{g3}^\lambda} \right), \quad k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (2.31)$$

Учитывая (2.3), (2.30) и (2.31), для интеграла по области «А» получим:

$$\Delta I^\lambda(A) = \frac{1}{2S_C} \int_0^{x_{\max}} V_{g\perp}^\lambda \cdot \sin \phi \left\{ \left| \frac{D-x}{\cos \phi} \cdot \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g\perp}^\lambda} \right| - L/2 \right\}^2 dx. \quad (2.32)$$

Из условия $x_{\max} > 0$ следует, что в рассматриваемом случае ($\text{tg } \phi = |V_{g2}/V_{g1}| < \mu$) неравенство $|\Lambda_3^\lambda(X_1, q)| \geq L/2$ сводится к следующему соотношению между компонентами групповой скорости и геометрическим параметром k_0 :

$$|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0. \quad (2.33)$$

Непосредственный расчет интеграла $\Delta I^\lambda(A)$ приводит к результату:

$$\Delta I^\lambda(A) = \frac{D}{6\mu} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{|V_{g\perp}^\lambda|} \cdot \frac{1}{\cos^2 \phi} - k_0 \cdot |V_{g3}^\lambda| \cdot \frac{1}{3 \cos \phi} + \frac{(k_0)^2}{3} |V_{g\perp}^\lambda| - (k_0)^3 \cdot \frac{(V_{g\perp}^\lambda)^2}{|V_{g3}^\lambda|} \cdot \cos \phi \right\}. \quad (2.34)$$

Нетрудно убедиться, что при интегрировании по областям «В» и «С» неравенство $|\Lambda_3^\lambda(X_1, \mathbf{q})| \geq L/2$ также сводится к выражению (2.33). Непосредственный расчет интегралов по областям «В»

и «С» дает:

$$\Delta I^\lambda(B) = \frac{D}{2\mu} \left\{ \frac{(V_{g3}^\lambda)^2}{|V_{g\perp}^\lambda|} \cdot \frac{1}{\cos \phi} - 2k_0 \cdot |V_{g3}^\lambda| + k_0^2 \cdot |V_{g\perp}^\lambda| \cdot \cos \phi \right\} (\mu - \operatorname{tg} \phi), \quad \Delta I^\lambda(C) = \Delta I^\lambda(A). \quad (2.35)$$

просуммируем по всем трем областям и учтем, что $\operatorname{tg} \phi = |V_{g2}^\lambda| / |V_{g1}^\lambda|$, тогда при выполнении неравенств $|V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda / V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ получим:

$$I^\lambda(\theta, \varphi) = I_\infty^\lambda(\theta, \varphi) - \Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = Dk_0 |V_{g3}^\lambda| \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{2\mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3\mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}. \quad (2.36)$$

При выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda / V_{g2}^\lambda| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda|$ выражение для $I^\lambda(\theta, \varphi)$ в точности совпадает с (2.36).

Если ($|V_{g3}^\lambda| / |V_{g1}^\lambda| < k_0$ и $|V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda|$) или ($|V_{g3}^\lambda / V_{g2}^\lambda| < k_0 / \mu$ и $|V_{g2}^\lambda| > \mu |V_{g1}^\lambda|$), то $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$ и функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$ определяются выражениями (2.9) и (2.10), полученными ранее для образцов бесконечной длины [17]. Для того, чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (2.9), (2.10) и (2.36) положить $\mu = 1$.

Из приведенного выше анализа видно, что при аналитическом расчете величины $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$ для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями ограничения, накладываемые условием (2.22), в выражениях для теплопроводности (2.23) и (2.24) сводятся к системе неравенств между геометрическим параметром $k_0 = L/2D$ и отношениями компонент групповой скорости фононов. Поскольку эти неравенства могут быть включены в определение функций $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi)$ и $I^\lambda(\theta, \varphi)$, то мы получаем возможность определить времена релаксации фононов τ_B^λ при диффузном рассеянии на границах образца в соответствии с выражением:

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2}. \quad (2.37)$$

Время релаксации фононов на границах цилиндрических образцов, как следует из выражения (2.37), можно представить в виде:

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{4R}{\pi V_{g\perp}^\lambda} \left[1 - (1 + (\Delta^\lambda)^2) \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right)^3 + \right. \\ \left. + \Delta^\lambda \left(\arccos \Delta^\lambda + \Delta^\lambda \sqrt{1 - (\Delta^\lambda)^2} \right) \right], \text{ если } \Delta^\lambda(\theta, \varphi) \leq 1, \\ \tau_{B\infty}^\lambda, \text{ если } \Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1; \end{cases} \quad (2.38)$$

$$\Delta^\lambda = \frac{L}{4R} \frac{V_{g\perp}^\lambda}{|V_{g3}^\lambda|} \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}. \quad (2.39)$$

При выполнении неравенства $\Delta^\lambda(\theta, \varphi) > 1$ величина $\Delta I^\lambda(\theta, \varphi) = 0$. Поэтому $\tau_B^\lambda(\theta, \varphi)$ определяется выражением (2.13) для цилиндрических образцов бесконечной длины.

Времена релаксации фононов на границах для образцов конечной длины с прямоугольным сечением, как следует из формул (2.9), (2.10) и (2.36), определяются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов θ и φ . При выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ оно может быть преобразовано к виду:

$$\tau_B^\lambda = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi))^2} = \frac{D}{|V_{g3}^\lambda|} k_0 \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{2 \mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 \mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}, \quad k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (2.40)$$

При выполнении противоположных неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ для $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu$ для $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ величина $\Delta I^\lambda = 0$. В этом случае время релаксации фононов на границах определяется выражением $\tau_{B\infty}^\lambda$ (2.14), полученным ранее для образцов бесконечной длины. Окончательно выражения для времен релаксации на границах образца с прямоугольным сечением имеют вид

$$\tau_B^\lambda(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{D}{|V_{g3}^\lambda|} k_0 \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{2 \mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 \mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}, \\ \text{если} \left(\left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right| \geq k_0 \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda| \right) \text{ или} \left(\left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right| \geq \frac{k_0}{\mu} \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda| \right), \\ \tau_{B\infty}^\lambda, \text{ если} \left(\left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right| < k_0 \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda| \right) \text{ или} \left(\left| \frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right| < \frac{k_0}{\mu} \text{ и } \mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda| \right). \end{cases} \quad (2.41)$$

Для того чтобы перейти к образцам с квадратным сечением [28], достаточно в формуле (2.41) положить $\mu = 1$. Итак, времена релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах для образцов конечной длины с круглым и прямоугольным сечениями определяются кусочно-гладкими функциями.

Выражения для длин свободного пробега Λ и величин для каждой из ветвей фононного спектра Λ^λ у образцов конечной длины находятся аналогично случаю с образцами бесконечной длины (см. раздел 2.1). В результате получим:

$$\Lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda_1} \langle (S_0^{\lambda_1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \quad (2.42)$$

$$\Lambda^\lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S_0^\lambda)^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \quad (2.43)$$

где релаксационные функции $I^\lambda(\theta, \varphi)$ для образцов длины L с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями определяются формулами (2.5), (2.9), (2.10) и (2.36). Как и в случае образцов бесконечной длины, для граничного рассеяния в модели анизотропного континуума они выражаются через двукратный угловой интеграл.

Из формул (2.38) и (2.41) следует, что коэффициенты теплопроводности $\tilde{\kappa}(T) = \kappa(T)/D$ и, соответственно, длины свободного пробега $\tilde{\Lambda} = \Lambda(L, W, D)/D$, нормированные на толщину пленки D , зависят не от трех геометрических параметров образца (D, W и L), а только от двух

отношений: параметров $\mu = W/D$ и $k_0 = L/2D$. Тогда

$$\kappa(T, L, W, D) = D\tilde{\kappa}(T, k_0, \mu), \quad \Lambda(L, W, D) = D \cdot \tilde{\Lambda}(k_0, \mu). \quad (2.44)$$

Очевидно, что для образцов с квадратным сечением длины пробега фононов, нормированные на сторону сечения D , зависят только от параметра k_0 :

$$\Lambda(L, D, D) = D \cdot \tilde{\Lambda}(k_0). \quad (2.45)$$

Формулы (2.44) и (2.45) представляют интерес для экспериментальной проверки применимости теории [17] при исследовании фононного транспорта в упруго анизотропных кристаллах.

2.3 Режим граничного рассеяния. Анизотропия длин свободного пробега фононов в монокристаллических образцах кремния

Проанализируем анизотропию фононного транспорта в объемных образцах кремния при температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Сравним с результатами экспериментальных исследований [17]. Как видно из формул (2.20), (2.21), (2.42) и (2.43), анизотропия теплопроводности определяется анизотропией длин свободного пробега фононов Λ . Рассмотрим сначала угловые зависимости длин свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины. Поскольку длины свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины принято называть длинами Казимира Λ_C , то согласно формулам (2.19) и (2.21) имеем:

$$\Lambda_C = \Lambda_\infty = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda_1} \langle (S_0^{\lambda_1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}.$$

$$\Lambda_C^\lambda = \Lambda_\infty^\lambda = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S_0^\lambda)^{-2} \rangle} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}.$$

Для образца с квадратным сечением релаксационные функции $I_\infty^\lambda(\theta, \varphi)$ определяются формулами (2.9) и (2.10), а с круглым – формулой (2.5).

Рассмотрим вращение потока тепла (оси образца) в двух плоскостях: (1) в плоскости грани куба $\{100\}$ и (2) в диагональной плоскости куба $\{110\}$. Пусть угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z , направленной по ребру куба. Для этих случаев компоненты групповой скорости имеют вид:

$$(1) \quad V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \quad (2.46)$$

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

$$V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}, \quad (2.47)$$

где V_{g3}^λ - проекция групповой скорости на направление градиента температуры, которое совпадает с осью стержня, V_{g1}^λ и V_{g2}^λ - проекции групповой скорости на боковые грани образца.

Проанализируем угловые зависимости длин Казимира для образцов с круглым и квадратным сечениями, рассчитанные по формулам (2.19) и (2.21). При равенстве площадей квадратного и круглого сечений ($D^2 = \pi R^2$), нормируем длины Казимира Λ_C на сторону основания D для образца с квадратным сечением ($\tilde{\Lambda}_C(\psi) = \Lambda_C(\psi)/D$) и на $\sqrt{\pi}R$ для образца с круглым сечением радиуса R ($\tilde{\Lambda}_C(\psi) = \Lambda_C(\psi)/\sqrt{\pi}R$). В этом случае отличие угловых зависимостей длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_C(\psi)$ для образцов с круглым и квадратным сечением не превышает 1%. Для рассматриваемых случаев максимальное отклонение длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_C^\lambda(\psi)$ не превышает 1.6% для быстрой поперечной моды. В масштабе рисунка 2.5 эти кривые не различимы. Поэтому рисунок 2.5 относится фактически к образцам бесконечной длины, как с круглым, так и с квадратным сечениями.

Как видно из рисунка 2.5a, в окрестности направлений [100] при углах $\psi = \pm 0.06 + n\pi/2$ (n – целое число) длина свободного пробега достигает максимального значения для медленной поперечной моды. Она в 2 раза больше, чем значение Λ_C^{t1} и в 3 раза больше, чем Λ_C^L для продольных фононов. При переходе к направлению [110] ситуация меняется: длина свободного пробега для медленной поперечной моды уменьшается в 3 раза и имеет минимальное значение. максимальное значение длины свободного пробега имеет для быстрой поперечной моды. Она в 2.8 и 1.6 раза больше, чем для медленных поперечных и продольных фононов, соответственно. Для направления [111] максимальное значение длины свободного пробега имеет для продольных фононов. Она в 1.8 и 1.1 раза больше, чем для быстрых и медленных поперечных фононов, соответственно (см. рис. 2.5б). Для симметричных направлений отношение средних длин Казимира составляет $\Lambda_C^{[100]} : \Lambda_C^{[110]} : \Lambda_C^{[111]} = 1.74 : 1.21 : 1.00$.

Покажем, что использование выражений, полученных нами для длин свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния, позволяет описать экспериментальные данные по анизотропии теплопроводности для образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечением при низких температурах [17]. Для этого проанализируем угловые зависимости длин свободного пробега фононов в образцах с квадратным и прямоугольным сечениями, рассчитанные по формулам (2.42) и (2.43) для образцов длины L . Как видно из рисунков 2.6, рассчитанные нами угловые зависимости длин свободного пробега фононов в образцах кремния длины $L = 2.9$ см с квадратным поперечным сечением $D = 0.293$ см, для симметричных направлений хорошо согласуются с данными эксперимента [17].

Из рисунков 2.6 видно, что длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды в образцах конечной длины достигают максимальных значений в направлениях ее фокусировки, причем, в этих направлениях они превосходят длины пробега остальных колебательных мод. Так, например, фононы медленной поперечной моды фокусируются в направлении [100], и их длина свободного пробега превосходит длины свободного пробега фононов для быстрой поперечной и продольной мод в 1.63 раза и 2.36 раза, соответственно, а среднюю длину свободного пробега фононов в 1.30 раза. Фононы быстрой поперечной моды фокусируются в направлении [110], и их длина свободного пробега имеет максимальное значение. Она превосходит в этом

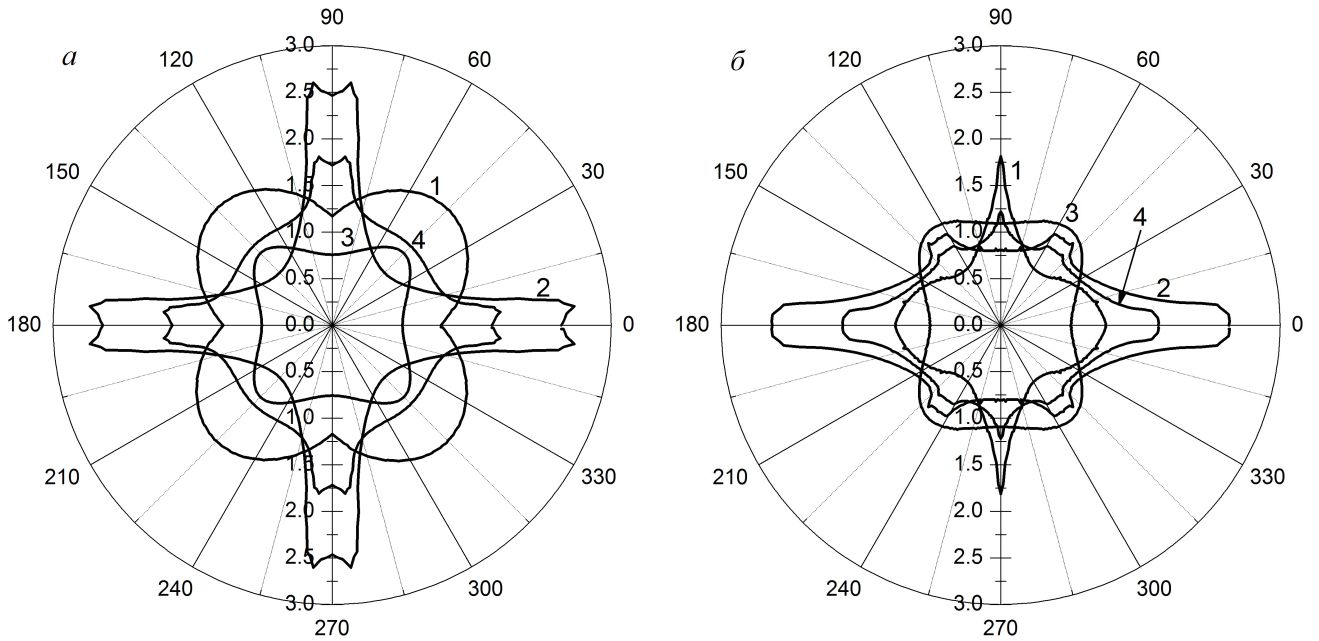


Рисунок 2.5. Угловые зависимости длин Казимира $\tilde{\Lambda}_C^\lambda(\psi) = \Lambda_C^\lambda(\psi)/D$ и $\tilde{\Lambda}_C(\psi) = \Lambda_C(\psi)/D$ для образцов с квадратным сечением в случаях, когда градиент температур лежит в плоскости грани куба (а) и диагональной плоскости (б). Кривая 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега.

направлении длины свободного пробега для фононов медленной поперечной моды в 1.50 раза и продольной моды в 1.19 раза, а также среднюю длину пробега в 1.22 раза. Продольные фононы фокусируются в направлении $[111]$, для этого направления их длина свободного пробега заметно превышает длины свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении длины свободного пробега фононов медленной и быстрой поперечных мод уменьшаются относительно направления $[100]$ в 1.82 и 1.52 раза, соответственно, в то время как для продольной моды Λ^L возрастает 1.51 раза. В результате длина свободного пробега продольных фононов оказывается больше в 1.58 раза и 1.16 раза, чем для быстрых и медленных поперечных фононов. В этом направлении она превосходит среднюю длину свободного пробега фононов в 1.26 раза. Для симметричных направлений отношение средних длин свободного пробега фононов составляет $\Lambda^{[001]} : \Lambda^{[101]} : \Lambda^{[111]} = 1.50 : 1.08 : 1$. Таким образом, максимальные значения теплопроводности образцов кремния имеет для направления $[100]$ и обеспечивается медленной поперечной модой, а минимальное — для направления $[111]$. При переходе от образцов бесконечной длины к образцам конечной длины анизотропия длин свободного пробега фононов и, соответственно, теплопроводности заметно уменьшается.

Следует отметить, что рассчитанные величины теплопроводности кремния $\kappa_{theor}(T_0)$ и средних длин свободного пробега фононов превышают экспериментальные значения $\kappa_{exp}(T_0)$ при $T_0 = 3$ К для направлений типа $[100]$ на 4%, а для $[110]$ и $[111]$ — на 8% (см. рис. 2.6). Для объяснения этого расхождения в работах [27, 28] была использована концепция дефектного поверхностного слоя, развитого в работе [69]. Дело в том, что для обеспечения диффузного рассеяния фононов поверхность образца перед измерением обрабатывалась наждаком. При такой

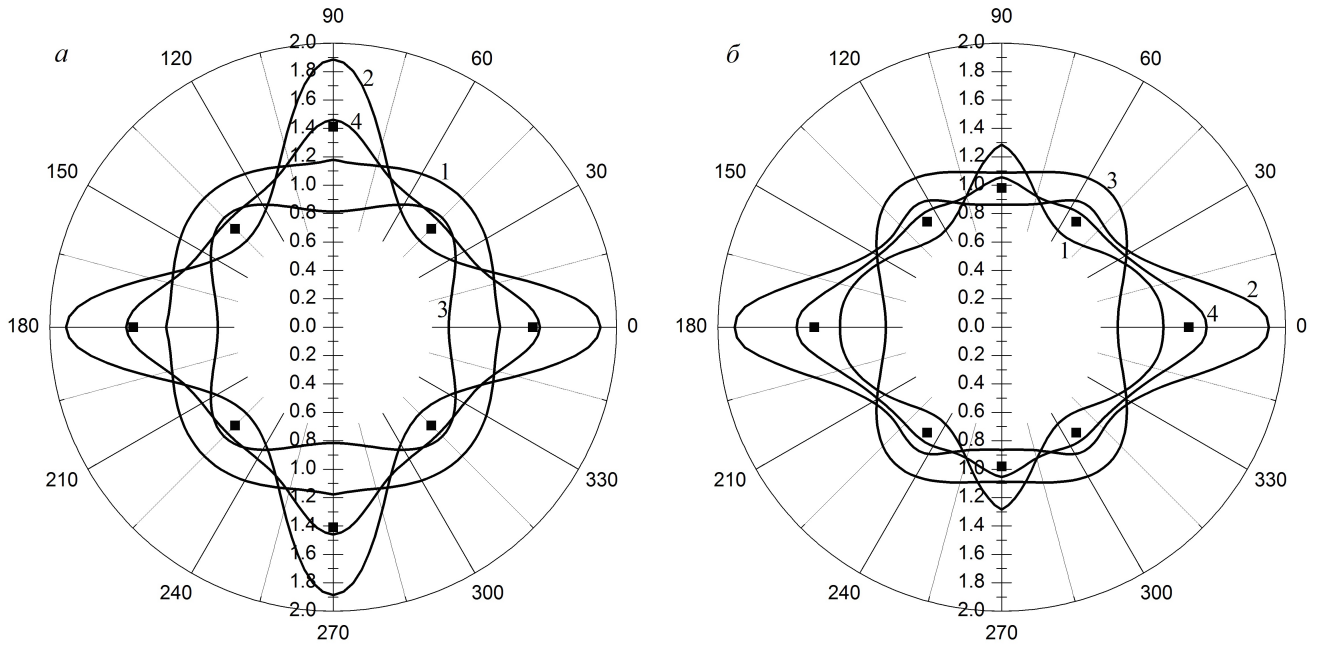


Рисунок 2.6. Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}^\lambda(\psi) = \Lambda^\lambda(\psi)/D$ и $\tilde{\Lambda}(\psi) = \Lambda(\psi)/D$ для образцов длины $L = 2.9$ см с квадратным сечением $D = 0.293$ см в случаях, когда градиент температур лежит в плоскости грани куба (а) и в диагональной плоскости (б). Кривая 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега. Символы — экспериментальные данные [17].

обработке непосредственно под поверхностью образца формируется дефектный слой, включающий микротрещины с соответствующими полями деформаций и сеть дислокаций [69]. Учет дефектного слоя, который не проводит тепла, и, соответственно, эффективной толщины образца позволило согласовать результаты расчета теплопроводности с экспериментальными данными при температуре 3 К. Однако при таком подходе не учитывалось рассеяние фононов на изотопическом беспорядке. Как будет показано в разделе 3.3, учет этого механизма позволит согласовать результаты расчета теплопроводности с экспериментом в интервале температур от 3 до 16 К в пределах погрешности эксперимента. Поэтому в нашем случае роль дефектного поверхностного слоя оказалась малой и его влиянием можно пренебречь.

Теперь рассмотрим угловые зависимости средних длин свободного пробега фононов для образцов конечной длины ($L = 3.5$ см) с прямоугольным сечением $\mu D \times D$ ($D = 0.185$ см, $\mu D = 0.638$ см), исследованных в [17]. Проведем сравнение с образцами с квадратным поперечным сечением. Длины свободного пробега фононов нормируем на среднюю геометрическую ширину

$$\hat{\Lambda}(\psi) = \Lambda(\psi)/D\sqrt{\mu}.$$

Рассмотрим вращение потока тепла (градиента температуры) в плоскости грани куба в двух случаях: (А) в узкой грани прямоугольника (ось «2» - ось вращения)

$$V_{g3}^\lambda = V_{gx}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda \cos \psi - V_{gz}^\lambda \sin \psi; \quad (2.48)$$

(Б) в широкой грани прямоугольника (ось «1» - ось вращения)

$$V_{g3}^{\lambda} = -V_{gy}^{\lambda} \sin \psi + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = V_{gy}^{\lambda} \cos \psi + V_{gz}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda}, \quad (2.49)$$

где V_{g3}^{λ} - проекция групповой скорости на направление градиента температуры, которое совпадает с осью стержня, V_{g1}^{λ} и V_{g2}^{λ} - проекции групповой скорости на боковые грани образца. Угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z .

Как видно из рисунка 2.7а, для направлений, исследованных в [17], рассчитанные значения средних длин свободного пробега фононов совпадают с экспериментально определенными в [17] как для образцов с квадратным сечением, так и для образцов с прямоугольным сечением.

Максимальные значения средних длин свободного пробега фононов для случаев (А) и (Б) совпадают и достигаются в направлениях [001], а минимальные значения - в направлениях [101], причем, для случаев (А) и (Б) они различны (см. рис. 2.7а). Поэтому анизотропия средних длин свободного пробега фононов и, соответственно, теплопроводности для случаев (А – кривая 1а) и (Б – кривая 1б) значительно отличается как между собой, так и от полученной для образцов с квадратным сечением (кривая 1). В случае (Б), если вращение потока тепла происходит в широкой грани прямоугольника, то отношение значений $\Lambda(0)$ и $\Lambda(\pi/4)$ составляет 1.21 (кривая 1б). Это значение оказывается меньшим, чем для образцов с квадратным сечением, для которых отношение $\Lambda_B(0)/\Lambda_B(\pi/4) \cong 1.4$ (кривая 1).

В противоположность этому, если вращение потока тепла происходит в узкой грани прямоугольника, то анизотропия теплопроводности возрастает. Она оказывается больше, чем для образцов с квадратным сечением: в этом случае отношение $\Lambda(0)/\Lambda(\pi/4) \cong 1.57$ (кривая 1а). для случаев (А) и (Б) угловые зависимости средних длин свободного пробега фононов и длин свободного пробега фононов для каждой из ветвей фононного спектра качественно отличаются (см. рис. 2.7б). Наиболее значительно изменяются угловые зависимости длин пробега для быстрых $\Lambda^{t_1}(\psi)$ и медленных $\Lambda^{t_2}(\psi)$ поперечных фононов. Для случая (Б) длина пробега Λ^{t_1} достигает максимума в направлении фокусировки - [101], а минимального значения - в направлении [001], как и для образцов с квадратным сечением. Однако для случая (А) длина пробега Λ^{t_1} достигает максимума в направлении [001], оставаясь меньше величины Λ^{t_2} , а минимального значения - в направлении фокусировки - [101] (см. рис. 2.7). Этот результат качественно отличается от полученных ранее для образцов с квадратным сечением [28]. Для последних было показано, что длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем, в этих направлениях они превосходят длины пробега для остальных колебательных мод.

Достаточно интересно (см. рис. 2.8) по сравнению с образцами квадратного сечения выглядят угловые зависимости теплопроводности и, соответственно, длин свободного пробега фононов $\Lambda^{\lambda}(\psi)$ в случае, когда ось вращения и градиент температуры совпадают с осью Z , а вращение происходит в плоскости XY . Тогда компоненты групповой скорости фононов, параллельные и перпендикулярные потоку тепла, определяются выражениями:

$$V_{g3}^{\lambda} = V_{gz}^{\lambda}, \quad V_{g1}^{\lambda} = V_{gx}^{\lambda} \cos \psi + V_{gy}^{\lambda} \sin \psi, \quad V_{g2}^{\lambda} = -V_{gx}^{\lambda} \sin \psi + V_{gy}^{\lambda} \cos \psi, \quad (2.50)$$

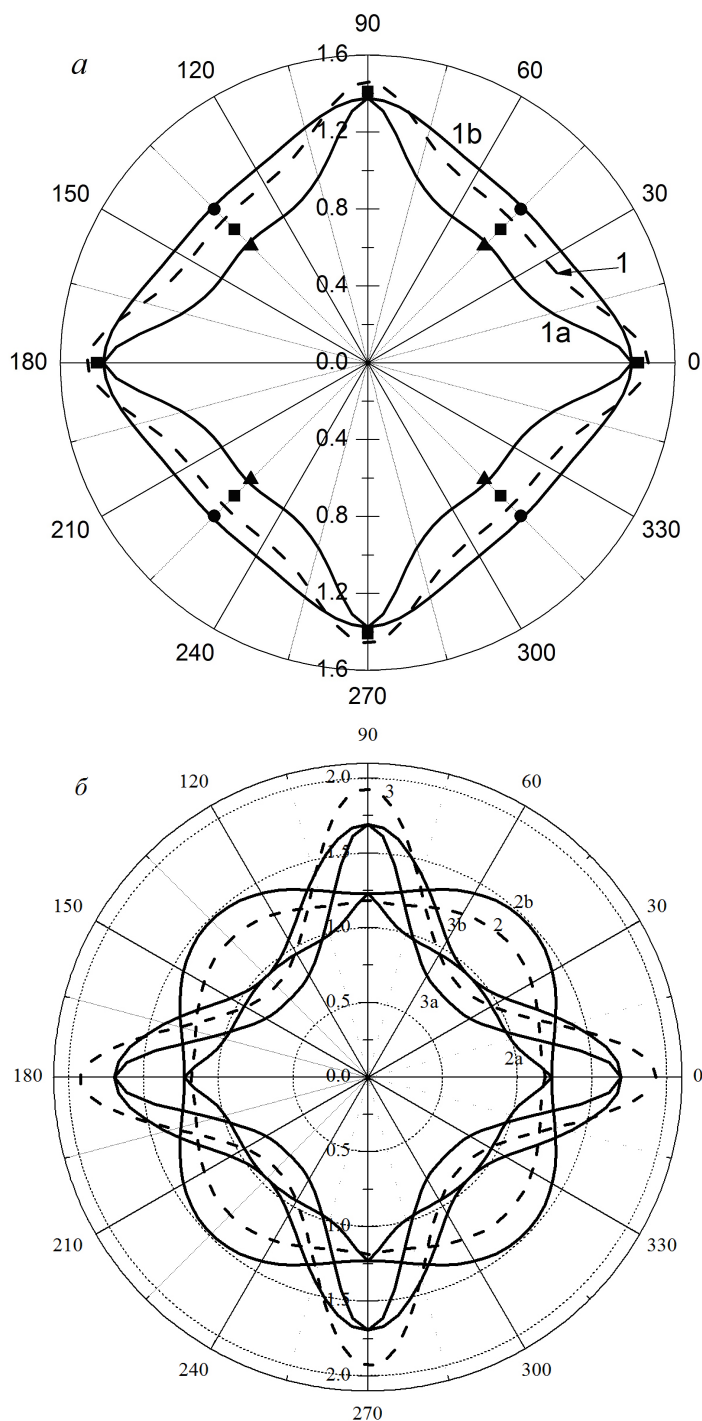


Рисунок 2.7. (а) Угловые зависимости средних длин свободного пробега $\hat{\Lambda}(\psi)$ в случае, когда поток тепла вращается в плоскости грани куба: кривая 1 для образцов с квадратным сечением ($D = 0.293$ см, $L = 2.9$ см); кривые 1а и 1б - для образцов с прямоугольным сечением ($L = 3.5$ см, $D = 0.185$ см, $\mu D = 0.638$ см); кривая 1а - в узкой грани прямоугольника; кривые 1б - в широкой грани прямоугольника. Символы - экспериментальные данные [17]. (б) Угловые зависимости длин пробега $\hat{\Lambda}^\lambda(\psi)$ быстрых (кривые 2, 2а, 2б) и медленных (кривые 3, 3а, 3б) поперечных фононов в случае, когда поток тепла вращается в плоскости грани куба: кривые 2, 3 для образцов с квадратным сечением ($D = 0.293$ см, $L = 2.9$ см); кривые 2а, 3а и 2б, 3б - для образцов с прямоугольным сечением ($L = 3.5$ см, $D = 0.185$ см, $\mu D = 0.638$ см); кривые 2а, 3а - вращение в узкой грани прямоугольника; кривые 2б, 3б - вращение в широкой грани прямоугольника.

где ψ – угол между осью X и боковой гранью.

В этом случае для образцов с квадратным сечением средние и парциальные длины свободного пробега фононов с точностью до 1.3% изотропны (см. рис. 2.8б, кривые 1,2,3). Однако для достаточно тонких пластинок величины теплопроводности и длин свободного пробега становятся зависящими от ориентации широких граней пластинки относительно осей кристаллов. Так, например, при $\mu = 1$ средняя нормированная длина пробега $\hat{\Lambda}(0) = 1.46$. Однако при $\mu = 10$ максимальное значение $\hat{\Lambda}(0) \cong 1.2$ достигается для граней образца $\{100\}$ ($\psi = 0$), а минимальное $\hat{\Lambda} \cong 1.02$ достигается при $\psi \approx 27^\circ$, тогда как для граней образца $\{110\}$ ($\psi = \pi/4$) имеет место локальный максимум $\hat{\Lambda}(\pi/4) = 1.04$ (см. рис. 2.8а, кривая 2). При $\mu = 100$ максимальное значение $\hat{\Lambda}(0) \cong 0.821$, оно в 1.47 раза меньше, чем для случая $\mu = 10$.

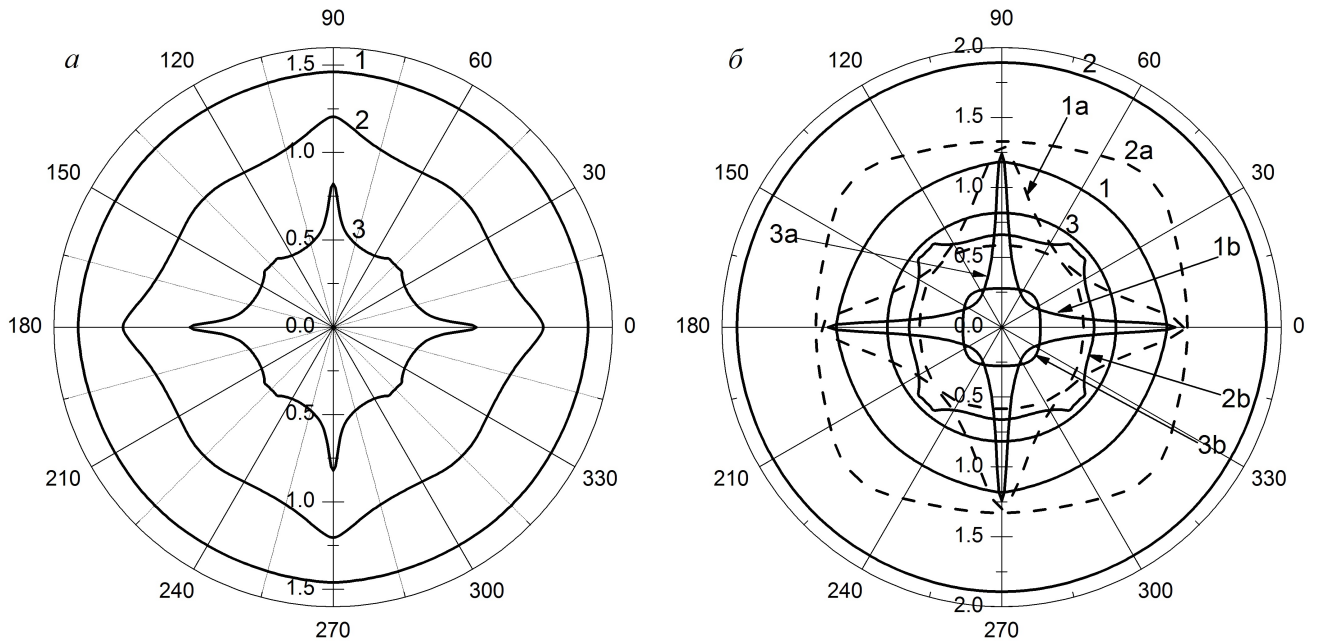


Рисунок 2.8. (а) Угловые зависимости $\hat{\Lambda}(\psi)$ для образцов с осью вращения и градиентом температуры в направлении $[100]$. Кривая 1 – $\mu = 1$, кривая 2 – $\mu = 10$, кривая 3 – $\mu = 10^2$. (б) Угловые зависимости $\hat{\Lambda}^\lambda(\psi)$ для быстрой (кривые 1, 1а, 1б), медленной поперечной (кривые 2, 2а, 2б) и продольной моды (кривые 3, 3а, 3б), для образцов с градиентом температуры в направлении $[100]$: для кривых 1,2,3 $\mu = 1$ (квадратное сечение), для кривых 1а, 2а, 3а $\mu = 10$, для кривых 1б, 2б, 3б $\mu = 10^2$. Параметры образцов те же, что и на рисунках 2.7.

В направлении $[110]$ реализуется локальный максимум $\hat{\Lambda}(\pi/4) = 0.50$, а минимальное значение $\hat{\Lambda} = 0.47$ достигается при $\psi \approx 27^\circ$. Анизотропия теплопроводности, пропорциональная отношению длин свободного пробега для ориентации граней образца $\{100\}$ и $\{110\}$ составляет 1.15 и 1.63 для $\mu = 10$ и $\mu = 100$, соответственно. При увеличении коэффициента μ от 1 до 10^2 , качественно изменяются угловые зависимости длин свободного пробега быстрых и медленных поперечных фононов (см. рис. 2.8б). Если при $\mu = 1$ длина пробега медленных поперечных фононов $\Lambda^{t_2}(0)$ превосходит значение $\Lambda^{t_1}(0)$ приблизительно в 1.63 раза, то для образцов с прямоугольным сечением при $\mu \gg 1$ отношение $\Lambda^{t_2}(0)/\Lambda^{t_1}(0)$ оказывается существенно меньше: при μ равном 10 и 10^2 , оно принимает значения 1.02 и 0.53, соответственно (см. рис. 2.8б кривые 1, 1а и 2, 2а). В противоположность этому, при $\psi = \pi/4$ отношение длин свободного пробега

медленных и быстрых поперечных фононов для образцов с квадратным сечением оказывается меньше единицы $\Lambda^{t_2}(\pi/4)/\Lambda^{t_1}(\pi/4) = 0.67$. Однако для образцов с прямоугольным сечением при $\mu \gg 1$ длина пробега $\Lambda^{t_2}(\pi/4)$ становится больше, чем для моды t_1 : в этом случае отношение $\Lambda^{t_2}(\pi/4)/\Lambda^{t_1}(\pi/4) = 2.31$ и 3.03 при $\mu = 10$ и $\mu = 10^2$, соответственно (см. рис. 2.8б).

Итак, показано, что полученные выражения для времен релаксации фононов (2.38), (2.41) и длин свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния (2.42), (2.43), позволяют описать два эффекта в анизотропии теплопроводности, обнаруженные экспериментально на кремниевых образцах [17]: 1) зависимость теплопроводности от направления потока тепла для образцов с квадратным поперечным сечением; 2) зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней для образцов с прямоугольным поперечным сечением. Анизотропия теплопроводности (средних длин свободного пробега фононов) для образцов с прямоугольным сечением может значительно отличаться от образцов с квадратным сечением. Наиболее существенно изменяются угловые зависимости длин свободного пробега фононов для быстрой и медленной поперечных мод.

В дальнейшем полученные в этой главе аналитические результаты для времен релаксации и длин свободного пробега фононов будут использованы для анализа фононного транспорта в объемных и наноразмерных материалах.

2.4 Выводы

Основные выводы главы 2 могут быть сформулированы следующим образом:

1. Дано полное аналитическое решение проблемы кнудсеновского течения фононного газа для образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Определены времена релаксации при диффузном рассеянии фононов на границах в виде кусочно-гладких функций для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами образцов.
2. Проведенный анализ показал, что при низких температурах длины свободного пробега фононов в образцах с квадратным и круглым сечениями для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод. Рассчитанные значения длин пробега фононов для симметричных направлений хорошо согласуются с данными эксперимента.
3. Показано, что для образцов с квадратным сечением величины теплопроводности и длин пробега фононов при низких температурах определяются, главным образом, направлением теплового потока, а их зависимость от ориентации боковых граней мала. В то время как для образцов с прямоугольным сечением они в значительной степени зависят от ориентации широкой грани образца относительно осей кристалла.

Глава 3

Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности объемных кремниевых образцов

Экспериментальные исследования [17] показали, что при низких температурах, когда длина свободного пробега фононов оказывается больше поперечного размера образца, фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности кубических кристаллов. Первым эффектом является зависимость теплопроводности от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей. Вторым эффектом является зависимость величин теплопроводности от ориентации боковых граней образцов с прямоугольным поперечным сечением относительно осей кристалла. В работе [30] показано, что для корректного учета этих эффектов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов следует ввести два ориентационных параметра, которые учитывают зависимости кинетических характеристик от направления теплового потока $[I]$ и ориентации плоскости пленки (или широкой грани образца) $\{J\}$. Поэтому в отличие от изотропной среды, при расчете кинетических характеристик монокристаллических образцов мы должны учесть их зависимость от ориентационных параметров $[I]$ и $\{J\}$:

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

В разделе 3.1 исследовано влияние дисперсии тепловых фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности в режиме граничного рассеяния. В разделе 3.2 развит метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности. В разделе 3.3 показано, что использование времен релаксации фононов (2.41) позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и боковых граней образца. Материал этой главы основан на работах [27, 30].

3.1 Влияние дисперсии фононов на температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si в режиме граничного рассеяния

Проанализируем влияние дисперсии тепловых фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности $\kappa(T)$ в режиме граничного рассеяния для образцов Si с квадратным сечением ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см), исследованных в [17]. В этих образцах граничное рассеяние вносит доминирующий вклад в теплосоппротивление при температурах меньших 20 К. Однако мы распространили свой анализ до температур $T \sim 200$ К. Связано это с тем, что в дальнейшем мы планируем применить развитый в этой главе метод к анализу фононного транспорта в наноразмерных образцах. Для таких образцов граничное рассеяние остается эффективным механизмом релаксации фононов вплоть до комнатных температур [6]. Так, например, для кремниевых нанопроводов с диаметром 56 нм вклад граничного рассеяния в теплосоппротивление при комнатной температуре составляет 60%. Поэтому представляется интересным, во-первых, изучить влияние дисперсии тепловых фононов (а именно, наличие плоских участков в спектре поперечных фононов, приводящих к аномально низким значениям групповой скорости) на особенности фононного транспорта в режиме граничного рассеяния. Во-вторых, при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам происходит изменение направлений фокусировки фононов, связанное с дисперсией тепловых фононов. Поэтому необходимо изучить влияние этого эффекта на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности.

В режиме граничного рассеяния, когда диффузное рассеяние фононов на границах образца является единственным механизмом релаксации фононов, выражение для теплопроводности в приближении времени релаксации имеет вид

$$\kappa_B(T) = \frac{k_B}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \left(\frac{z_{0m}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{S_0^{\lambda}(\theta, \varphi)} \right)^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda}(x, \theta, \varphi))^2 (z^{\lambda})^2 x^2 dx}{\nu_B^{\lambda}(q) (\text{sh}(z^{\lambda}/2))^2}, \quad (3.1)$$

$$z^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_q^{\lambda}(x, \theta, \varphi)}{k_B T}, \quad z_{0m}^{\lambda}(\theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_{0m}^{\lambda}(\theta, \varphi)}{k_B T} = \frac{\hbar S_0^{\lambda}(\theta, \varphi) q_{\max}(\theta, \varphi)}{k_B T}, \quad x = \frac{q}{q_{\max}},$$

где k_B - постоянная Больцмана, T - температура, (θ, φ) - углы, задающие направление волнового вектора фонона \mathbf{q} , q_{\max} - максимальный волновой вектор фонона (1.18), $\nu_B^{\lambda}(q) = (\tau_B^{\lambda}(q))^{-1}$ - скорость релаксации фононов на границах (2.41), ω_q^{λ} - частота фонона поляризацией λ с учетом дисперсии тепловых фононов (1.16), $S_0^{\lambda}(\theta, \varphi)$ - фазовая скорость фонона (1.4). Компоненты групповой скорости, параллельные оси стержня V_{g3}^{λ} и перпендикулярные боковым граням образца V_{g1}^{λ} , V_{g2}^{λ} , определены формулой (2.46).

Как видно из рисунка 3.1, для направления [001] при температурах ниже 10 К кривые, рассчитанные с учетом дисперсии (1.16) (сплошные кривые) и в модели анизотропного континуума (1.1) (штриховые кривые) практически совпадают. В этой области температур доминирующий вклад в теплопроводность вносят поперечные фононы. Вклад продольных фононов $\kappa^L(T)$ мал, он составляет приблизительно 10% полной теплопроводности. Отметим, что учет дисперсии

приводит к возникновению двух факторов, влияющих противоположным образом на изменение теплопроводности с повышением температуры: (1) к росту $\kappa(T)$ за счет увеличения плотности состояний поперечных фононов (пики плотности состояний соответствуют плоским участкам спектра поперечных фононов) и (2) к замедлению роста $\kappa(T)$ за счет аномального уменьшения групповой скорости поперечных фононов при выходе на плоские участки спектра (см. рис. 1.4). Как видно из рисунка 3.1, дисперсия начинает заметно влиять на теплопроводность уже при $T > 20$ К. Этот результат согласуется с выводом работы [70] о том, что влияние дисперсии на фокусировку наблюдается на частотах выше 0.4 ТГц.

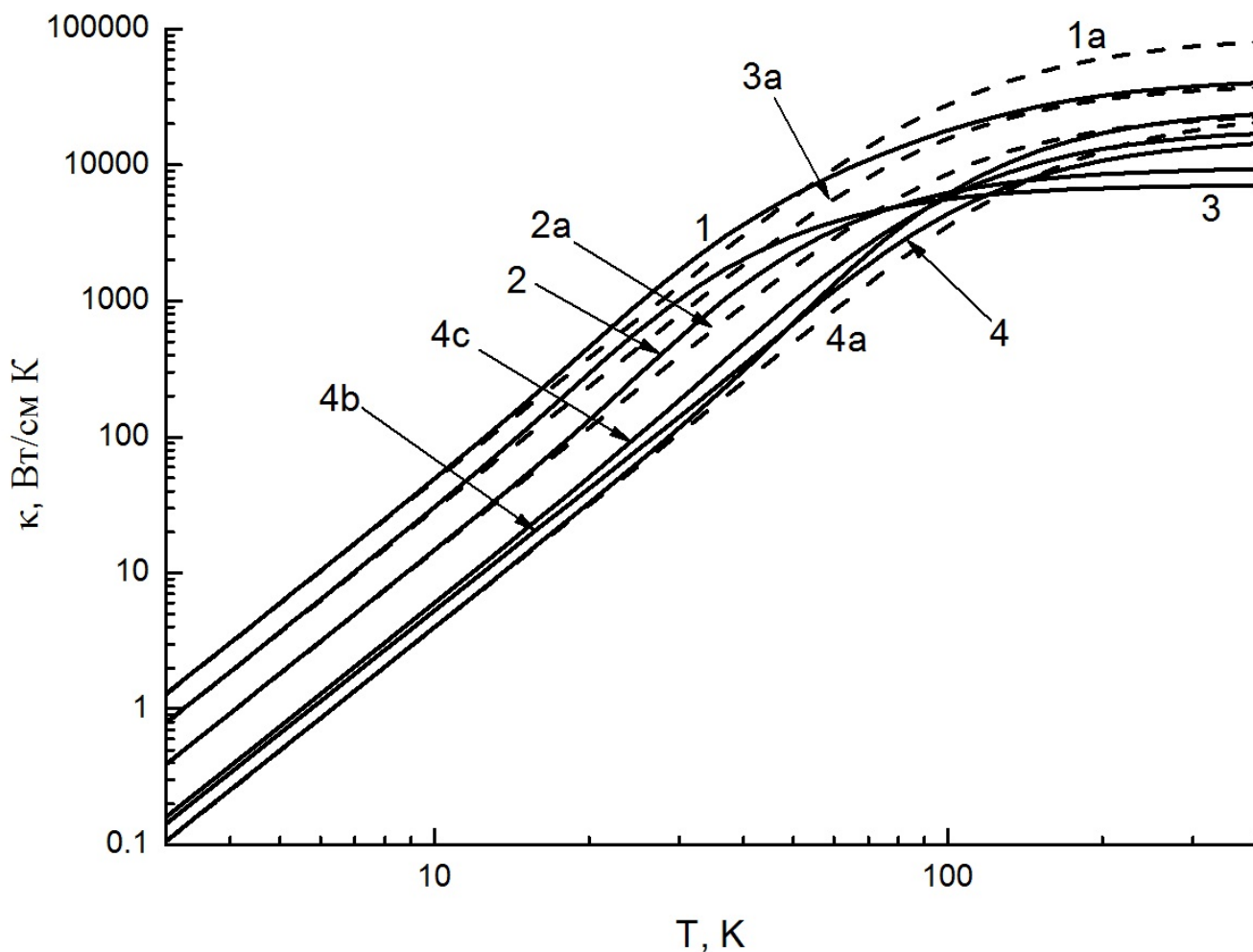


Рисунок 3.1. Температурные зависимости $\kappa(T)$ образцов с квадратным сечением, исследованных в [17], ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см) в режиме граничного рассеяния (кривые 1, 1a), а также вклады быстрых поперечных (кривые 2, 2a), медленных поперечных (кривые 3, 3a) и продольных (кривые 4, 4a) фононов для образцов с осью вдоль [100] и вклады продольных фононов для образцов с осями в направлениях [110] (кривая 4b) и [111] (кривая 4c). Сплошные линии (кривые 1, 2, 3, 4, 4b, 4c) — расчет с учетом дисперсии фононов, штриховые (кривые 1a, 2a, 3a, 4a) — в модели анизотропного континуума.

С увеличением температуры значения полной теплопроводности, рассчитанные с учетом дисперсии фононов (кривая 1), начинают превосходить значения, рассчитанные в модели анизотропного континуума (кривая 1a): при температуре 32 К, их максимальное отношение составляет 1.32 (в этой области преобладает первый фактор). При дальнейшем увеличении температуры это

отношение уменьшается, причем при температурах больших 54 К оно становится меньшим единицы. Такое поведение обусловлено уменьшением групповой скорости медленных поперечных фононов в области плоского участка спектра $q_{\max}/2 < q < q_{\max}$ (см. рис. 1.4) и, соответственно, их вклада в теплопроводность (преобладает второй фактор). Как видно из рисунка 3.1, вклад медленной поперечной моды $\kappa^{t2}(T)$ (кривая 3), доминирующий при низких температурах и превосходящий в два раза вклад быстрой моды, при $T > 77$ К становится меньше вклада быстрой моды $\kappa^{t1}(T)$ (кривая 2).

При дальнейшем увеличении температуры преобладает второй фактор: сильная дисперсия коротковолновых поперечных мод (уменьшение их групповых скоростей) приводит к значительному замедлению роста $\kappa^{t1}(T)$ и $\kappa^{t2}(T)$. Как видно из рисунка 1.4, дисперсия оказывает существенно меньшее влияние на продольные моды - их групповые скорости уменьшаются незначительно. Вклад $\kappa^L(T)$ при $T > 70$ К возрастает значительно быстрее, чем вклады поперечных мод (см. рис. 3.1). Поэтому при $T > 96$ К вклад $\kappa^L(T)$ становится больше вклада $\kappa^{t2}(T)$, а при $T > 101$ К он становится больше вклада быстрой поперечной моды и в 1.1 раза превосходит вклад $\kappa^{t2}(T)$. В противоположность этому расчет теплопроводности для модели анизотропного континуума (штриховые кривые) дает качественно отличный результат. Вклады $\kappa^{t2}(T)$ и $\kappa^{t1}(T)$ (кривые 3а и 2а) при 110 К остаются больше вклада продольных фононов в $\kappa(T)$ (кривая 4а) в 4 и 2.3 раза, соответственно. Таким образом, расчет в режиме граничного рассеяния показал, что вклад поперечных фононов в теплопроводность кристаллов Si доминирует при температурах, меньших 100 К, тогда как при $T > 150$ К, вклад продольных фононов становится преобладающим.

Достаточно любопытно выглядит изменение угловых зависимостей теплопроводности и вкладов в теплопроводность от различных ветвей фононного спектра с увеличением температуры (см. рис. 3.2). Такое поведение связано с изменением анизотропии спектра фононов при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам и обусловлено влиянием дисперсии на фокусировку фононов различных ветвей спектра. Как видно из рисунков 3.2а и 3.2в при температуре 3 К основной вклад в теплопроводность вносят медленные поперечные фононы. Они фокусируются в направлении [001], и их вклад в этом направлении максимален – он достигает 61% полной теплопроводности. В направлении [101] вклад медленной поперечной моды минимален (направление дефокусировки) и составляет 39%, тогда как вклад быстрой поперечной моды максимален и составляет 46% (см. таблицу 3.1). Вклад продольных фононов для всех направлений значительно меньше. Его максимальное значение 19% достигается в направлении фокусировки [111], а минимальное 8% – в направлении дефокусировки [001] (см. таблицу 3.1).

Как видно из таблицы 3.1, при $T = 50$ К качественных изменений в соотношении теплопроводностей различных ветвей фононного спектра не происходит. Однако при температурах выше 110 К в теплопроводности начинают преобладать продольные фононы. Они фокусируются уже в направлении [001], и вклад $\kappa^L(T)$ в этом направлении превышает вклады медленной и быстрой поперечных мод в 1.3 и 1.2 раза, соответственно (см. рис. 3.2б). Для направления [111], при $T = 110$ К вклад $\kappa^L(T)$ сравнивается с вкладом быстрой поперечной моды и почти в три раза превосходит вклад медленной моды (см. рис. 3.2г). Однако в направлении [101], в котором

Таблица 3.1. Относительные вклады различных ветвей фононного спектра в полную теплопроводность $\tilde{\kappa}_{[I]}^\lambda(T) = \kappa_{[I]}^\lambda(T)/\kappa_{[I]}(T)$ для симметричных направлений $[I]$ при температурах $T = 3, 50$ и 110 К.

$\tilde{\kappa}_{[I]}^\lambda(T)$	[100]			[101]			[111]		
	3 К	50 К	110 К	3 К	50 К	110 К	3 К	50 К	110 К
$\tilde{\kappa}_{[I]}^{t_1}$	0.31	0.38	0.33	0.46	0.54	0.45	0.30	0.51	0.42
$\tilde{\kappa}_{[I]}^{t_2}$	0.61	0.50	0.29	0.39	0.31	0.19	0.51	0.28	0.16
$\tilde{\kappa}_{[I]}^L$	0.08	0.12	0.38	0.15	0.15	0.36	0.19	0.21	0.42

фокусируются фононы быстрой поперечной моды t_1 при $T = 110$ К, вклад продольных фононов $\kappa^L(T)$ оказывается меньше вклада $\kappa^{t_1}(T)$ в 1.3 раза, но больше вклада $\kappa^{t_2}(T)$ в 1.9 раза (см. рис. 3.2г). Из таблицы 3.1 следует, что наиболее резко возрастает относительный вклад продольных фононов в теплопроводность для направления [100]: при повышении температуры от 3 до 110 К величина $\tilde{\kappa}_{[001]}^L(T) = \kappa_{[001]}^L(T)/\kappa_{[001]}(T)$ возрастает в 4.7 раза, тогда как для направления [111] он увеличивается только в 2.2 раза. В связи с этим мы проанализировали температурные зависимости вклада продольных фононов в теплопроводность для всех симметричных направлений и обнаружили достаточно любопытный эффект: изменение направления фокусировки продольных фононов приводит к изменению температурной зависимости вклада продольных фононов в теплопроводность в кристаллах Si. Как уже отмечалось в главе 1, при $x \ll 1$ продольные фононы фокусируются в направлениях типа [111], а при $x > 0.5$ - уже в направлении [100]. Поэтому с повышением температуры от 3 до 110 К меняется не только анизотропия вклада продольных фононов в $\kappa(T)$ (ее максимум, как видно из рисунка 3.2, переходит из направления [111] в [100]), но и температурная зависимость теплопроводности для направления [100].

Исследование фононного транспорта в режиме граничного рассеяния фононов показало, что наличие протяженных плоских участков в спектре поперечных фононов приводит к аномально низким значениям групповой скорости и существенному уменьшению их вклада в теплопроводность с повышением температуры. Вклад продольных фононов с повышением температуры возрастает, и при $T > 110$ К становится доминирующим.

Изменение анизотропии спектра при переходе от длинноволновых к коротковолновым фононам может приводить не только к изменению анизотропии теплопроводности с повышением температуры, но и к изменению температурных зависимостей $\kappa(T)$ в режиме граничного рассеяния, как это имеет место для вклада продольных фононов в $\kappa(T)$ кристаллов Si в направлении [001].

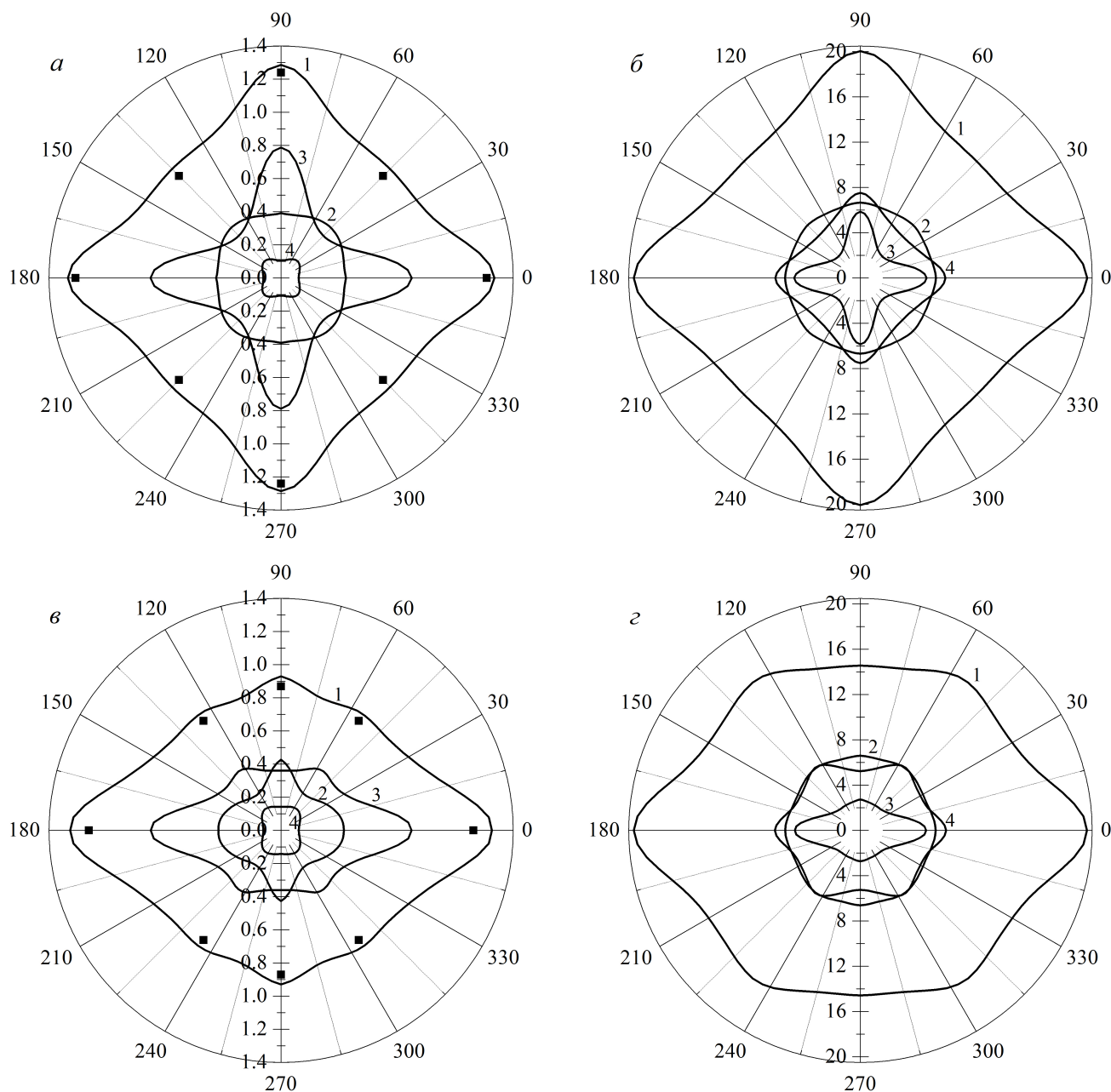


Рисунок 3.2. Угловые зависимости полной теплопроводности ($\text{Вт см}^{-1} \text{К}^{-1}$ ($a, в$) и $\text{кВт см}^{-1} \text{К}^{-1}$ ($б, г$)) (кривые 1) и вкладов в теплопроводность каждой из ветвей фононного спектра при температурах 3 К – ($a, в$), 110 К – ($б, г$) для образцов с квадратным сечением ($L = 2.9$ см и $D = 0.293$ см): кривые 2 – для быстрой поперечной моды, кривые 3 – для медленной поперечной моды, кривые 4 – для продольной моды; для случаев: ($a, б$) – ось образца (и градиент температуры) вращается в плоскости грани куба, ($б, г$) – ось образца вращается в диагональной плоскости. Символы – экспериментальные значения [17].

3.2 Механизмы релаксации и теплопроводность кристаллов кремния

В настоящем разделе при расчете теплопроводности кремния, в отличие от ранее опубликованных работ [3–10, 14–16, 18, 19, 21–23], мы учтем фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности кубических кристаллов от направления теплового потока и

ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла. Анализ теплопроводности проведем в рамках трехмодовой модели Каллавея [31–34]. В этой модели выделяются вклады резистивных $\nu_{R[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(q)$ и нормальных $\nu_N^\lambda(q)$ процессов релаксации фононов в полную скорость релаксации $\nu_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(q)$, где \mathbf{q} — волновой вектор фонона. Резистивные процессы рассеяния фононов — процессы рассеяния, приводящие к релаксации импульса фононной системы. К ним относятся рассеяние фононов на фононах в процессах переброса — $\nu_U^\lambda(q)$, на дефектах — $\nu_{iso}^\lambda(q)$ и границах образца $\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$, поэтому $\nu_{R[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} = \nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} + \nu_{iso}^\lambda(q) + \nu_U^\lambda(q)$. В нормальных процессах релаксации импульс фононной системы сохраняется. Эти процессы перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение, которое описывается смещенной функцией планка [31–34]. Если в этих процессах участвуют фононы различных поляризаций, то они стремятся установить одинаковую скорость дрейфа для всех ветвей фононного спектра. В отличие от ранее опубликованных работ [1, 31–36] при анализе фононного транспорта мы учитываем фокусировку фононов и обусловленную ей зависимость теплопроводности от ориентации теплового потока. Решеточную теплопроводность в трехмодовой модели Каллавея можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного $\kappa_{dif[I(\psi)]}^{\{J\}}$ и дрейфового $\kappa_{dr[I(\psi)]}^{\{J\}}$ вкладов. Как будет показано далее, для образцов, исследованных в работе [17], в интервале температур от 3 до 40 К дрейфовый вклад в теплопроводность можно не учитывать. Выражение для теплопроводности в этом случае имеет вид (см. Приложение А):

$$\begin{aligned} \kappa_{dif[I(\psi)]}^{\{J\}} &= \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^\lambda)^2 (z^\lambda)^2 x^2}{\nu_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} (\text{sh}(z^\lambda/2))^2} dx, \\ \kappa_{dr[I(\psi)]}^{\{J\}(1)} &= \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{\{J\}(1)}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь $z^\lambda = \hbar\omega_q^\lambda/k_B T$, $x = q/q_{\max}(\theta, \varphi)$, $y(T, \theta, \varphi) = q_{\max}(\theta, \varphi)/q_T$, $q_T = k_B T/\hbar$, $q_{\max}(\theta, \varphi)$ — максимальный волновой вектор (1.18), углы (θ, φ) определяют направление волнового вектора фонона, V_{g3}^λ — проекция групповой скорости на направление градиента температуры, ω_q^λ — частота фонона с поляризацией λ при учете дисперсии тепловых фононов (см. формулу (1.16)). Функции $B_{[J(\psi)]}^{\{I\}(1)}(T)$ и $\Psi_{N[J(\psi)]}^{\{I\}\lambda}$ определены в Приложении А.

Проанализируем температурные зависимости теплопроводности для образцов с квадратным ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см) и прямоугольным ($L = 3.5$ см, $D_1 = D = 0.185$ см, $D_2 = \mu D = 0.638$ см, $\mu = 3.45$) сечениями, исследованных в [17]. Из (2.41) следует, что при выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ скорость релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах образца с прямоугольным сечением имеет вид:

$$\nu_{B[I]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{\mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 \mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1}, \quad k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (3.3)$$

При выполнении противоположных неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$

$$\nu_{B[I]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \nu_{B\infty[I]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{6\mu}{D} \frac{(V_{g1}^\lambda)^2}{(3\mu |V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}^\lambda| < \mu |V_{g1}^\lambda| \text{ и } |V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0 \\ \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{(3 |V_{g2}^\lambda| - \mu |V_{g1}^\lambda|)}, & \text{если } |V_{g2}^\lambda| > \mu |V_{g1}^\lambda| \text{ и } |V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu. \end{cases} \quad (3.4)$$

Для того чтобы перейти к образцам с квадратным сечением [28], достаточно в формулах (3.3) и (3.4) положить $\mu = 1$. Зависимости теплопроводности от направления градиента температуры $[I(\psi)]$ и ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла $\{J\}$ определяются величинами компонент групповой скорости фононов. Они входят непосредственно в теплопроводность и в скорости релаксации $\nu_{B[I]}^{\lambda\{J\}}$.

Для учета влияния фокусировки фононов на анизотропию теплопроводности монокристаллических образцов достаточно выразить ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ через компоненты групповой скорости. Для этого рассмотрим вращение потока тепла в трех плоскостях, совпадающих с ориентацией широкой грани образца с прямоугольным сечением: (1) широкая грань образца с прямоугольным сечением совпадает с плоскостью грани куба YZ $\{J\}=\{100\}$, (2) широкая грань образца совпадает с диагональной плоскостью $J=\{110\}$, (3) широкая грань образца перпендикулярна диагонали куба $\{J\}=\{111\}$. Определим лабораторную систему координат, связанную с образцом. Ось «3» направим вдоль оси образца и, соответственно, направления теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно широкой грани образца, она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно двум узким боковым граням образца. Учтем, что спектр и групповые скорости фононов определены в системе координат по ребрам куба. Тогда компоненты групповой скорости фононов в лабораторной системе координат для рассматриваемых случаев могут быть представлены в следующем виде

$$(1) \quad V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \quad (3.5)$$

$$(2) \quad V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}, \quad (3.6)$$

$$(3) \quad V_{g3}^\lambda = (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \cos \psi, \\ V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \sin \psi, \\ V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda) / \sqrt{3}. \quad (3.7)$$

Как видно из рисунка 3.3, для данного сечения кубического кристалла $\{J\}$ зависимость направления потока тепла и осей образца от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^λ . Проекция групповой скорости V_{g1}^λ не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения и определяет плоскость пленки. Компонента V_{g2}^λ зависит от угла ψ и определяет ориентацию двух

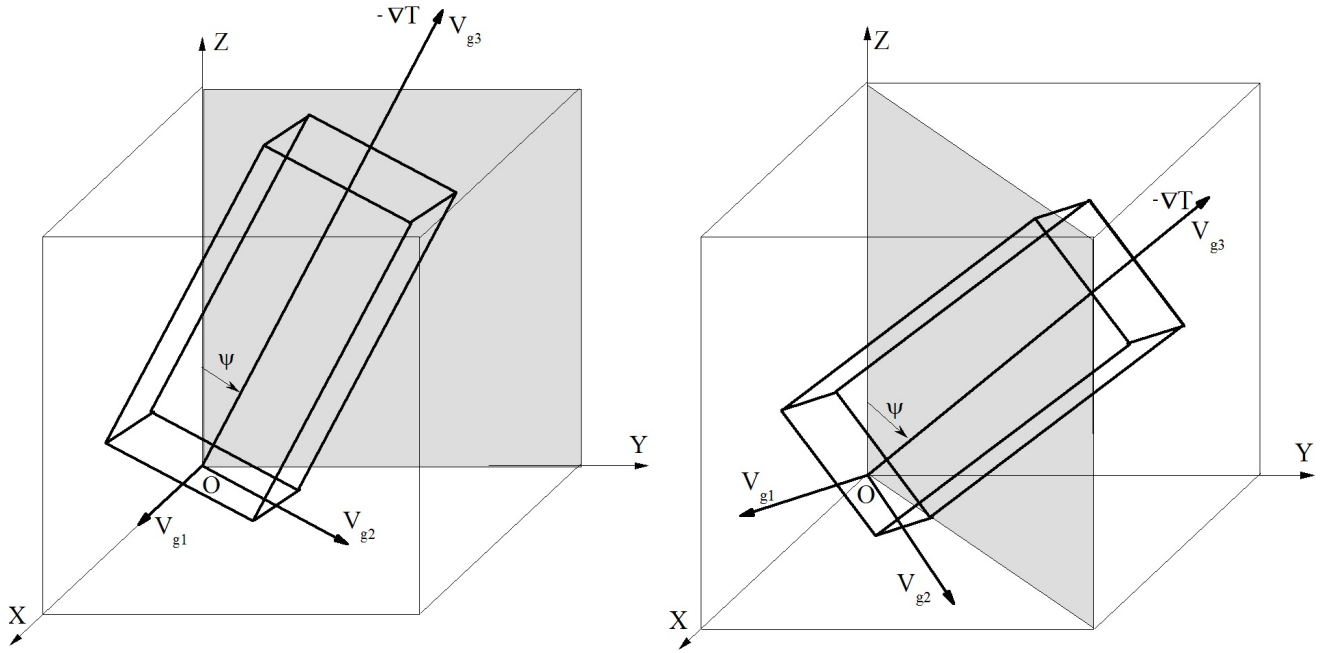


Рисунок 3.3. Схема, иллюстрирующая определение угла ψ при вращении градиента температуры: (1) - в плоскости грани куба ZY ($\{J\} = \{100\}$) и (2) - в диагональной плоскости ($\{J\} = \{110\}$). V_{g1}^λ , V_{g2}^λ и V_{g3}^λ - компоненты групповой скорости.

других граней образца. Для образцов с прямоугольным сечением, исследованных в работе [17], первый случай, когда широкая грань совпадает с $\{100\}$, а узкая с $\{110\}$, а градиент температур направлен вдоль $[110]$, соответствует выражению (3.5) с углом $\psi = \pi/4$. Второй случай, когда широкая грань совпадает с $\{110\}$, а узкая с $\{100\}$, а градиент температур направлен вдоль $[110]$, соответствует выражению (3.6) с углом $\psi = \pi/2$.

Итак, мы показали, что ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные теплому потоку.

Выражение для скорости релаксации фононов на изотопическом беспорядке в кубических кристаллах, согласно [67, 71], имеет вид:

$$\nu_{iso}(q_1, \lambda_1) = \frac{\pi}{6} g V_0 (\omega_{q_1}^{\lambda_1})^2 D(\omega_{q_1}^{\lambda_1}), \quad D(\omega_{q_1}^{\lambda_1}) = \frac{1}{V} \sum_{q_2 \lambda_2} \delta(\omega_{q_1}^{\lambda_1} - \omega_{q_2}^{\lambda_2}). \quad (3.8)$$

Здесь V_0 - объем, приходящийся на один атом, g - фактор изотопического беспорядка, $g = \sum_i C_i (\Delta M_i / \bar{M})^2$, где $\Delta M_i = M_i - \bar{M}$, M_i - масса i -го изотопа, $\bar{M} = \sum_i C_i M_i$ - средняя масса изотопной композиции, а C_i - концентрация i -го изотопа, $D(\omega)$ - плотность фононных состояний, V - нормировочный объем. В модели анизотропного континуума выражение (3.8) можно представить в виде [72]:

$$\nu_{iso}^\lambda \cong A_{iso} (T z^\lambda)^4, \quad A_{iso} = \frac{g V_0}{12\pi} (k_B / \hbar)^4 \langle F \rangle, \quad \langle F \rangle = \sum_\lambda \langle F^\lambda \rangle, \quad (3.9)$$

Таблица 3.2. Параметры ангармонического фонон-фононного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке для кристаллов кремния с природным изотопическим составом (Si^{nat}).

$A_{iso}, \text{K}^{-4} \text{c}^{-1}$	$A_N^L, \text{K}^{-5} \text{c}^{-1}$	$A_N^t, \text{K}^{-5} \text{c}^{-1}$	$A_U^L, \text{K}^{-3} \text{c}^{-1}$	$A_U^t, \text{K}^{-3} \text{c}^{-1}$	C_U^L, K	C_U^t, K
0.46	0.8	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^3$	$0.70 \cdot 10^3$	310	98

$$\langle F^\lambda \rangle = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega F^\lambda(\omega; \theta, \varphi), \quad F^\lambda(\omega; \theta, \varphi) = \begin{cases} (S_0^\lambda(\theta, \varphi))^{-3}, & \text{если } \omega \leq \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi), \\ 0 & \text{если } \omega > \omega_{0m}^\lambda(\theta, \varphi); \end{cases}$$

Для кристаллов кремния с природным изотопическим составом (Si^{nat}) величина параметра изотопического беспорядка $g = 2.01 \cdot 10^{-4}$, а коэффициент $\langle F \rangle = 14.5 \cdot 10^{-18} (\text{с/см})^3$, если $\omega \leq \omega_{\max}^{t2}(\theta_{[111]}, \varphi_{[111]})$ [72]. При учете дисперсии фононов плотность фононных состояний $D(\omega)$ может быть определена из вида аппроксимационного спектра, согласно разделу 1.2. Выражение для скорости релаксации фононов в процессах переброса, согласно [21, 34, 53, 73–75], имеет вид

$$\nu_U^\lambda = A_U^\lambda (z^\lambda)^2 T^3 \exp\left(-\frac{C_U^\lambda}{T}\right). \quad (3.10)$$

Параметры A_U^λ, C_U^λ приведены в таблице 3.2.

Для продольных фононов основным механизмом N-процессов является механизм Херринга [37], в котором слияние продольного фонона с медленным поперечным фононом (ST) порождает быстрый фонон (FT):

$$\nu_N^L \cong A_N^L T^5 (z^L)^2. \quad (3.11)$$

Согласно общепринятым представлениям [15, 35, 76] основным механизмом N-процессов релаксации поперечных фононов является механизм Ландау-Румера [38], в котором слияние поперечного и продольного фононов порождает продольный фонон ($T_1 + L_2 \rightarrow L_3$):

$$\nu_N^t \cong A_{TLL}^N \cdot T^5 z^t. \quad (3.12)$$

Однако в работе [53] показано, что учет кубической анизотропии приводит к выполнению закона сохранения энергии в механизмах релаксации TTT , и эти механизмы в длинноволновом приближении вносят значительно больший вклад в релаксацию поперечных фононов, чем механизм Ландау-Румера. Для механизма TTT скорость релаксации ν_N^t определяется также выражением типа (3.12), но с коэффициентом A_{TTT}^N вместо A_{TLL}^N . Для значений подгоночных параметров, приведенных в таблице 3.2, частота релаксации поперечных фононов в N-процессах на два порядка меньше, чем для продольных в кристаллах Si. Нетрудно убедиться, что во всей температурной области для поперечных фононов выполняется неравенство $\nu_N^t(q) \ll \nu_R^t(q)$, и их вклад в теплопроводность определяется диффузионным движением. Для продольных фононов отношение $\nu_N^L/\nu_R^L < 1$ в интервале температур $1 < T < 12$ К, однако при более высоких температурах оно оказывается больше единицы. Поэтому для них необходимо сделать оценку вклада

дрейфового движения фононов в теплопроводность аналогично тому, как это сделано в работах [31, 32].

3.3 Сравнение результатов расчета температурных зависимостей теплопроводности с экспериментальными данными для образцов Si

Ниже приведены результаты расчёта теплопроводности $\kappa(T)$, согласно формулам (3.2)-(3.11), для образцов кремния конечной длины с квадратным и прямоугольным сечениями, исследованных в работе [17]. Подгонка результатов осуществлялась вариацией параметров ангармонических процессов рассеяния для того, чтобы добиться наилучшего совпадения результатов расчёта $\kappa(T)$ и экспериментальных данных в области максимума $\kappa(T)$. Расчетные параметры, полученные с использованием результатов работ [21, 31, 32, 35, 74], приведены в таблице 3.2.

Прежде всего, рассмотрим влияние различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si для значений подгоночных параметров, приведенных в таблице 3.2. Для этого возьмем образец с квадратным поперечным сечением [17] ($D = 0.293$ см, $L = 2.9$ см) и градиентом температуры вдоль направления [100]. При самых низких температурах при учете граничного рассеяния ($\nu^\lambda = \nu_B^\lambda$) теплопроводность следует зависимости $\kappa(T) \sim T^3$ (см. рис. 3.4, кривая 2).

В низкотемпературной области ($T = 3$ К) рассчитанные значения теплопроводности оказались на 4-8% выше экспериментальных значений. Для объяснения этого расхождения в работах [27, 28] была предложена концепция дефектного поверхностного рассеивающего слоя. Дело в том, что перед измерением теплопроводности поверхность образцов кремния обрабатывалась наждаком для того, чтобы обеспечить диффузное рассеяние фононов границами [17]. При такой обработке непосредственно под поверхностью образцов формируется дефектный слой материала [69], который не принимает участия в теплопереносе. Его толщина может достигать от одного до нескольких размеров частиц абразива (см. [3, 77]). Введение дефектного поверхностного слоя позволило согласовать результаты расчета теплопроводности с экспериментальными данными при $T = 3$ К. Однако при этом в работах [27, 28] не было учтено изотопическое рассеяние, вклад которого составляет 5% при $T = 3$ К. Учет его ($\nu^\lambda = \nu_B^\lambda + \nu_{iso}^\lambda$) позволяет согласовать результаты расчета с экспериментальными данными в пределах погрешности эксперимента без введения дефектного слоя. Как видно из рисунка 3.4 (кривая 3), результаты расчета теплопроводности при $\nu^\lambda = \nu_B^\lambda + \nu_{iso}^\lambda$ согласуются с экспериментом в интервале температур от 3 до 16 К с погрешностью, не превышающей 4%. Учет ангармонических процессов рассеяния позволяет согласовать результаты расчета с экспериментом [17] в окрестности максимума и во всем измеренном интервале температур вплоть до 40 К (см. рис. 3.4, кривая 1). Следует отметить, что главную роль в загибе температурной зависимости теплопроводности играют процессы переброса (сравните кривые 3 и 5 на рисунке 3.4).

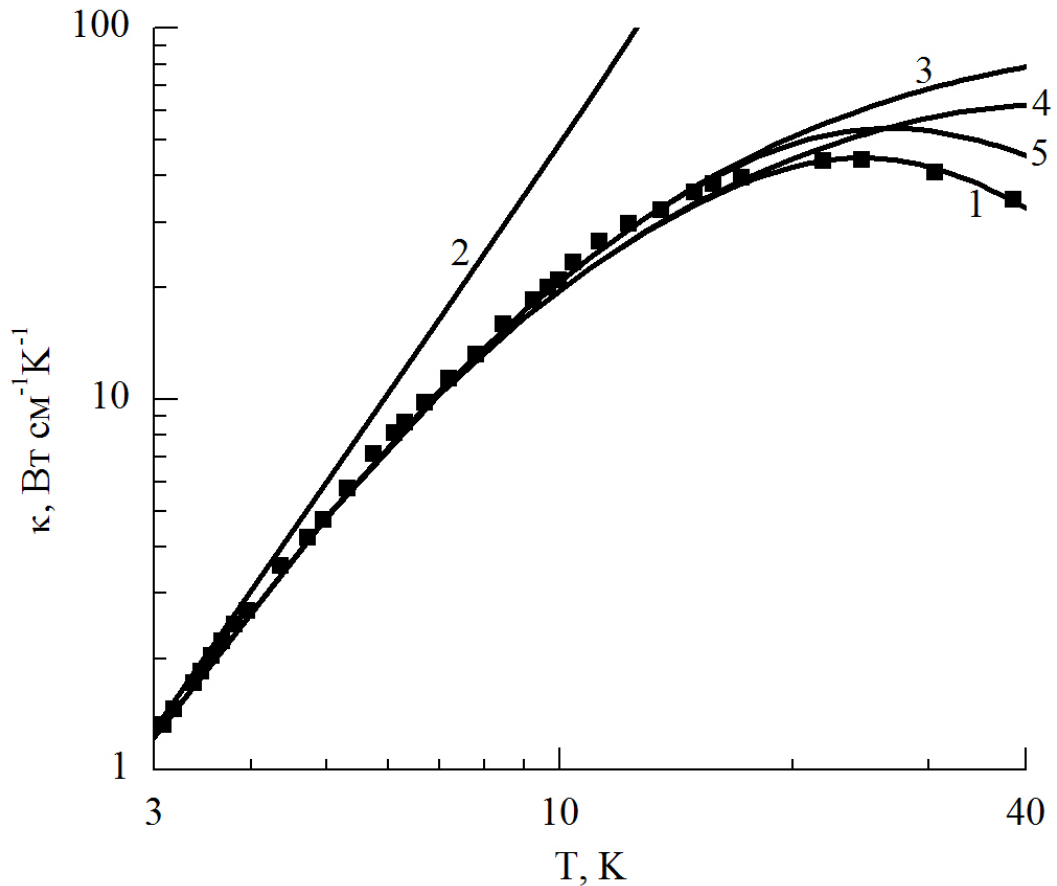


Рисунок 3.4. Температурные зависимости теплопроводности кристаллов Si с квадратным сечением ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см) для направления $[100]$ при учете всех механизмов релаксации фононов (кривая 1) и ее зависимостей для различных комбинаций механизмов релаксации фононов: кривая 2 соответствует расчету теплопроводности в режиме граничного рассеяния; кривая 3 - учет граничного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке; кривая 4 – учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и нормальных процессов фонон-фононного рассеяния, кривая 5 - учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и процессов переброса. Символы – экспериментальные значения [17].

На рисунке 3.5 представлены рассчитанные температурные зависимости теплопроводности образцов кремния с квадратным поперечным сечением для трех симметричных направлений теплового потока. Как видно из рисунка 3.5, развитая нами теория корректно описывает анизотропию теплопроводности для образцов кремния с квадратным сечением, т. е. первый эффект из обнаруженных в работе [17]. Максимальная теплопроводность наблюдается для образцов с направлением потока тепла вдоль $[100]$, и она превышает теплопроводность для образцов с осью вдоль $[110]$ и $[111]$ соответственно на 36 и 49%. Эти оценки согласуются с экспериментальной анизотропией теплопроводности [17]. Заметим, что вычисленные зависимости теплопроводности для образцов с направлением потока тепла вдоль $[100]$ и ориентациями широкой грани $\{100\}$ и $\{110\}$ неразличимы в масштабе рисунка 3.5.

Наша теория также удовлетворительно описывает и температурные, и ориентационные зависимости теплопроводности для двух образцов с прямоугольным сечением, имеющих одинаковую площадь поперечного сечения и одинаковое направление градиента температуры $[110]$, но различные ориентации широких граней образцов относительно кристаллографических осей (см.

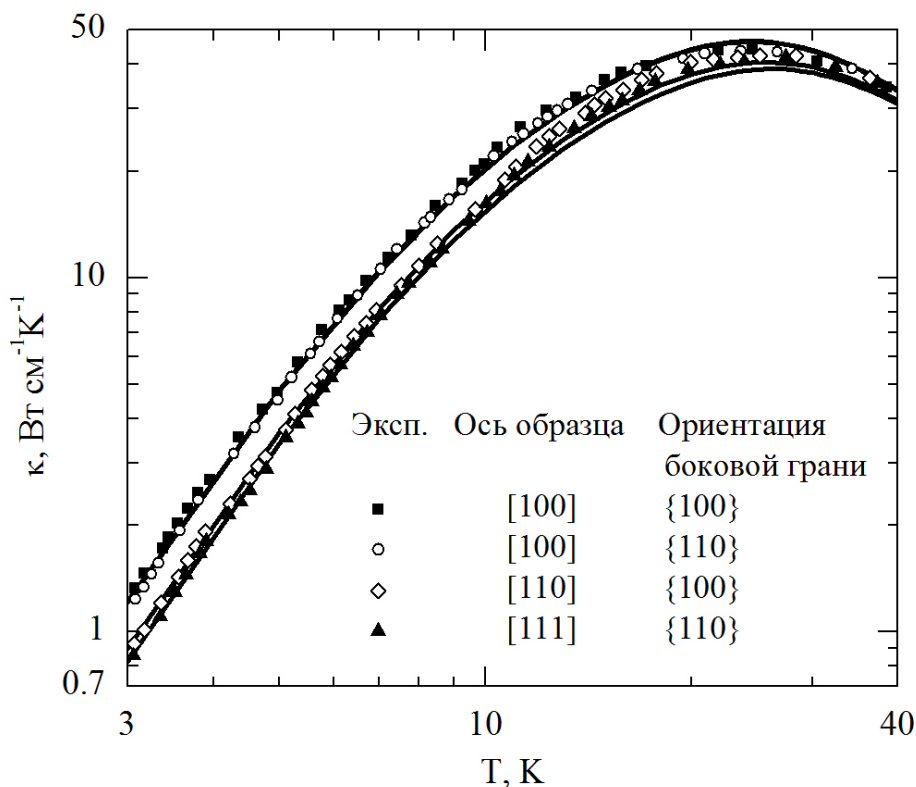


Рисунок 3.5. Температурные зависимости теплопроводности кристаллов кремния с квадратным сечением ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см) для симметричных направлений градиента температуры. Кривая 1 относится к направлению [100], кривая 2 - к направлению [110] и кривая 3 - к направлению [111]. Символы – экспериментальные значения [17].

рис. 3.6). При $T = 3$ К рассчитанная теплопроводность образца с широкой гранью {100} и узкой {110} оказалась на 30% выше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {100}. В пределах погрешности эксперимента этот результат согласуется с экспериментальной анизотропией [17], которая составила 33%. Отклонение рассчитанных значений $\kappa(T)$ от экспериментальных данных [17] для образцов с квадратным и прямоугольным сечениями (с различной ориентацией градиента температуры) для значений релаксационных параметров, приведенных в таблице 3.2, при $3 \text{ К} < T < 15 \text{ К}$ не превышает погрешности эксперимента (4%), а в окрестности максимума теплопроводности составляет (5–8)%.

Эксперимент [17] показывает, что при переходе от режима граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации (выше максимума) анизотропия теплопроводности, связанная с эффектом фокусировки, исчезает для образцов с квадратным и прямоугольным сечениями (см. рис. 3.5 и 3.6). Различие экспериментальных значений $\kappa(T)$ для различных направлений в окрестности максимума не превышает 6%, а при $T = 40$ К их значения практически совпадают, т.е. эффект фокусировки фононов уже не сказывается на величинах теплопроводности. Обращает на себя внимание, что рассчитанные значения $\kappa(T)$ для симметричных направлений в окрестности максимума и при $T \approx 40$ К заметно различаются. Так, например, при $T_{\max} = 25$ К значения $\kappa_{[001]}(T)$ оказываются выше, чем $\kappa_{[001]}^{\text{exp}}(T)$ на 5%, а значения $\kappa_{[111]}(T)$ и $\kappa_{[101]}(T)$ оказываются ниже величин $\kappa^{\text{exp}}(T)$ на 6% и 4%, соответственно. При $T = 38.5$ К рассчитанные значения $\kappa(T)$ для направлений [001], [101] и [111] отличаются от $\kappa^{\text{exp}}(T)$ на 2.5%, 5% и 7%, соответственно. Хотя

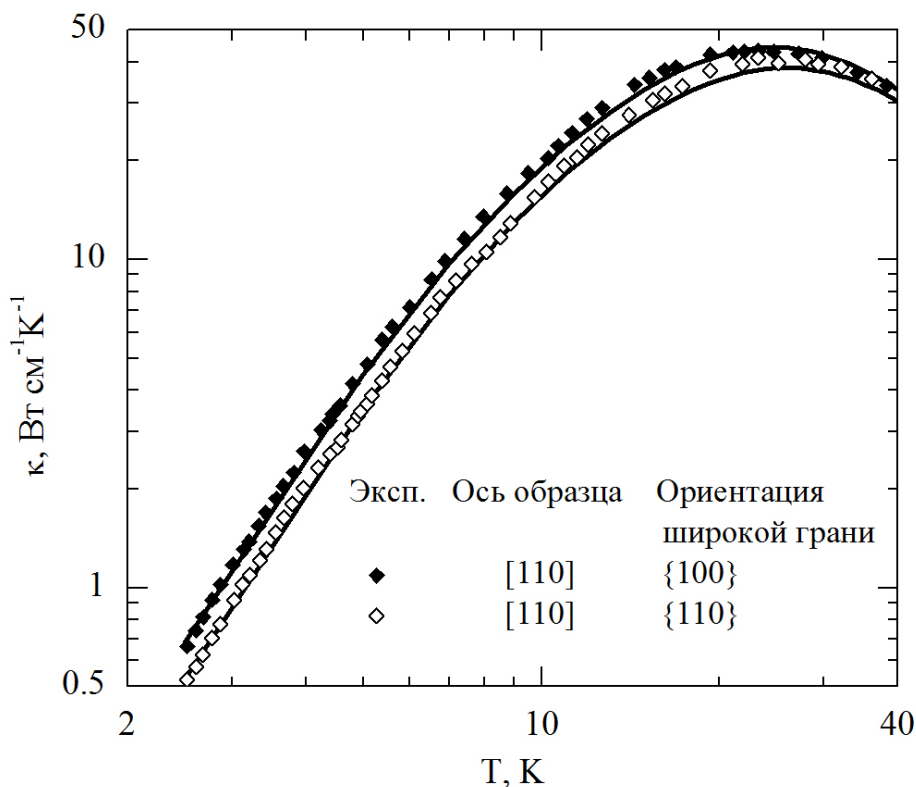


Рисунок 3.6. Температурные зависимости теплопроводности для стержня прямоугольного сечения ($L = 3.5$ см, $D_1 = 0.185$ см, $D_2 = \mu D_1 = 0.638$ см, $\mu = 3.45$) с ориентацией градиента температуры в направлении [110]. Кривая 1 относится к образцам с широкой гранью {100}, кривая 2 относится к образцам с широкой гранью {110}. Символы – экспериментальные значения [17].

отклонение теоретических зависимостей от экспериментальных данных в окрестности максимума не велико, однако результаты расчета дают для рассчитанных значений анизотропию 19% ($\kappa_{[001]}(25)/\kappa_{[111]}(25) \approx 1.19$). При более высоких температурах анизотропия теплопроводности уменьшается: значения $\kappa_{[001]}$ оказываются выше $\kappa_{[111]}$ при $T = 50$ К на 5%, при $T = 60$ К на 4%, а при $T = 100$ К на 1%. Возможной причиной расхождения с экспериментальными данными является использование правила Маттиссена для перехода от граничного рассеяния к объемному. Это приближение дает слишком медленное уменьшение анизотропии теплопроводности, связанное с фокусировкой и, видимо, не является достаточно точной процедурой в данном случае. Херринг [37,57], анализируя роль низкоэнергетических фононов в теплопроводности и термоэдс монокристаллических полупроводников, также указал на слабость правила Маттиссена при температурах вблизи максимума $\kappa(T)$. Поскольку граничное рассеяние фононов происходит вблизи поверхности образца, а объемные процессы рассеяния происходят равномерно по всему объему образца, поэтому они не могут аддитивно складываться, как это следует из правила Маттиссена. Очевидно, что максимальное отклонение от правила Маттиссена будет иметь место в условиях, когда скорости релаксации фононов в объемных механизмах и граничном рассеянии сравниваются. Для того, чтобы корректно учесть совместное действие граничного и объемных механизмов рассеяния фононов, необходимо решить кинетическое уравнение Больцмана при неоднородном

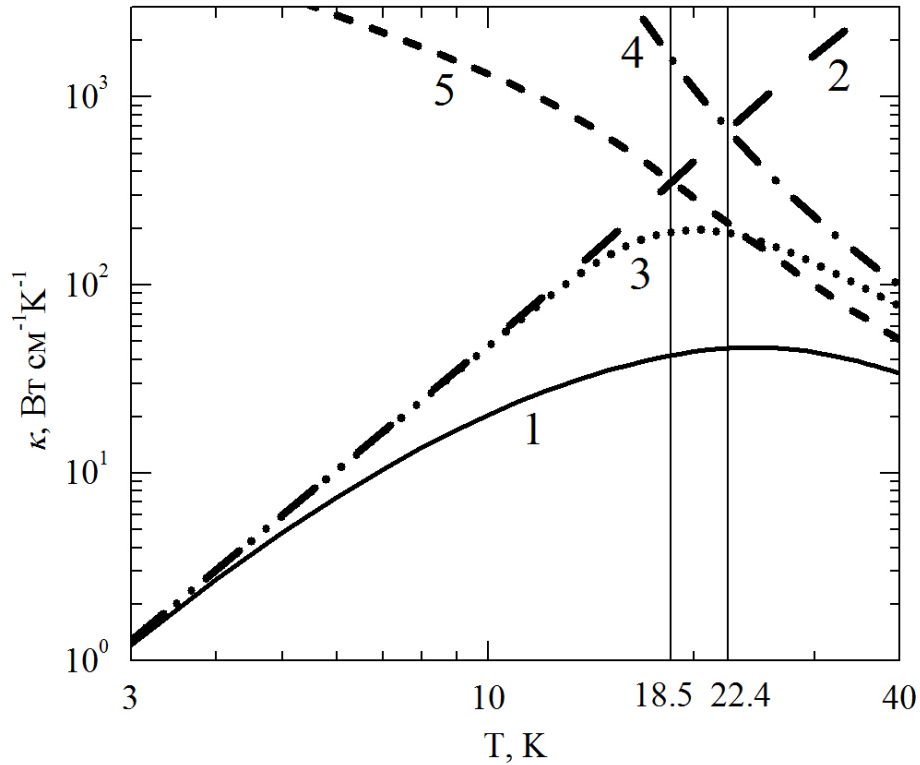


Рисунок 3.7. Температурные зависимости полной теплопроводности (кривая 1) и зависимости ее для различных механизмов релаксации фононов: кривая 2 - теплопроводность в режиме граничного рассеяния, кривая 3 - для моноизотопного образца Si^{28} , кривая 4 - для ангармонических процессов рассеяния, кривая 5 - для объемных механизмов рассеяния.

распределении теплового потока по поперечному сечению образца. При учете фокусировки фононов эта задача является достаточно сложной и требует отдельного рассмотрения.

Сравним роль граничного и объемных механизмов рассеяния фононов в теплопроводности кристаллов кремния. Для этого по формуле (3.2) рассчитаем $\kappa(T)$ в режиме граничного рассеяния фононов и при учете только объемных механизмов рассеяния фононов. При температурах ниже максимума теплопроводности доминирующий вклад в теплосопrotивление вносят рассеяние на границах и изотопическом беспорядке. Причем, при $T = 3$ К рассеяние на границах обеспечивает 95 % теплосопrotивления, а изотопическое рассеяние – 5%. С увеличением температуры относительный вклад рассеяния на границах уменьшается, а вклад изотопического рассеяния возрастает. Кривая 2 на рисунке 3.7 характеризует теплопроводность в режиме граничного рассеяния $\kappa_B(T)$ ($\nu_{(2)}^\lambda(q) = \nu_B^\lambda(q)$), а кривая 5 – теплопроводность при наличии только объемных механизмов релаксации ($\nu_{(5)}^\lambda = \nu_{iso}^\lambda(q) + \nu_U^\lambda(q) + \nu_N^\lambda(q)$). Пересечение этих кривых показывает, что при $T_B = 18.5$ К для кристаллов с натуральным составом изотопов Si^{nat} вклады в теплосопrotивление от объемных механизмов релаксации и граничного рассеяния сравниваются. Поэтому при $T = 18.5$ К происходит переход от режима граничного рассеяния к доминирующей роли объемных механизмов релаксации, и граничное рассеяние дает 50% полного теплосопrotивления. Как видно из рисунка 3.7, из сравнения зависимостей $\kappa_{iso}(T)$ для изотопически чистого образца (кривая 3 $\nu_{(3)}^\lambda(q) = \nu_B^\lambda(q) + \nu_U^\lambda(q) + \nu_N^\lambda(q)$) и образцов с натуральным составом изотопов Si^{nat} $\kappa_{nat}(T)$ (кривая 1 $\nu_{(1)}^\lambda = \nu_B^\lambda(q) + \nu_{iso}^\lambda(q) + \nu_U^\lambda(q) + \nu_N^\lambda(q)$) при учете только диффузионного

вклада температура максимума теплопроводности уменьшается от 25 К для $\kappa_{nat}(T)$ и до 20 К для изотопически чистого кремния $\kappa_{iso}(T)$. Причем, максимальные значения $\kappa_{iso}(T)$ больше, чем $\kappa_{nat}(T)$, и при $T = T_{max}$ вклад изотопического рассеяния в теплосоппротивление в 3.5 раза больше, чем суммарный вклад остальных механизмов релаксации. Заметим, что для изотопически чистого кремния переход от доминирующей роли граничного рассеяния (кривая 2) к доминирующей роли объемных механизмов релаксации (кривая 4, $\nu_{(4)}^\lambda(q) = \nu_U^\lambda(q) + \nu_N^\lambda(q)$), которые включают в себя только ангармонические процессы рассеяния, происходит при более высокой температуре, а именно при $T = 22.4$ К.

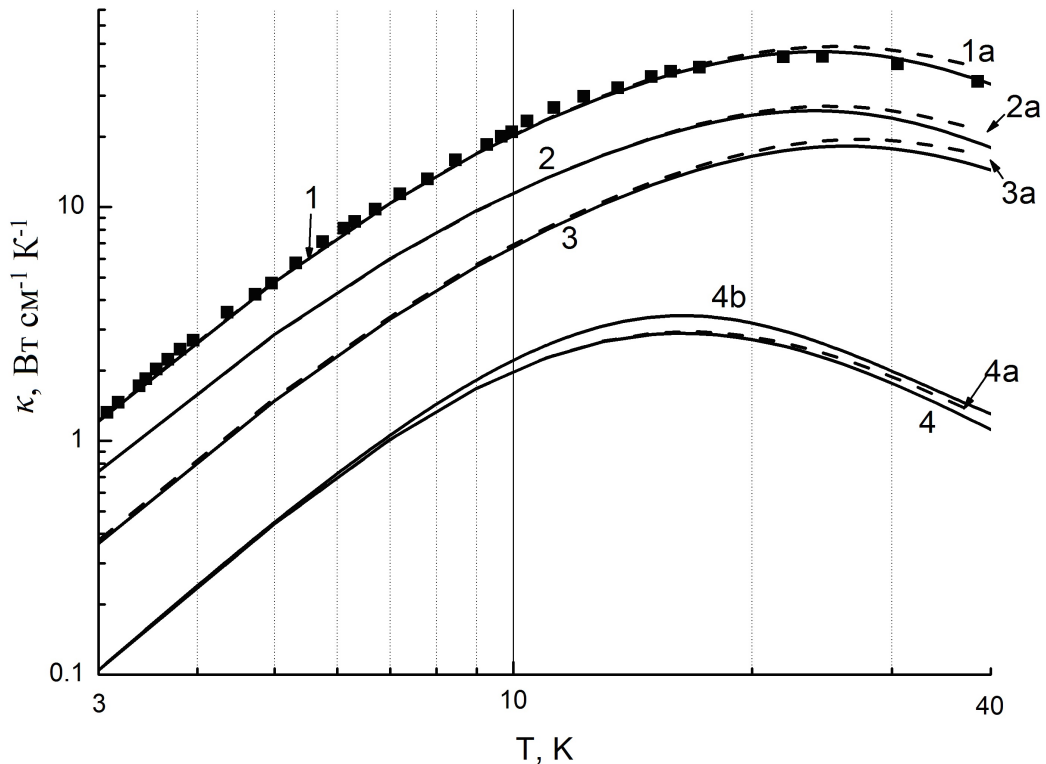


Рисунок 3.8. Температурные зависимости теплопроводности (кривые 1, 1а), а также вкладов в теплопроводность медленных (кривые 2, 2а), быстрых (кривые 3, 3а) поперечных и продольных (кривые 4, 4а, 4б) фононов для образцов с квадратным сечением для направления [001]. Кривые 1,2,3,4 рассчитаны с учетом дисперсии, кривые 1а,2а,3а,4а рассчитаны в модели анизотропного континуума. Кривая 4б – вклад продольных фононов с учетом их дрейфового движения. Символы – экспериментальные значения [17].

Рассмотрим влияние дисперсии тепловых фононов на зависимость теплопроводности $\kappa(T)$ кристаллов Si от температуры. Из рисунка 3.8 видно, что для направления [100] при температурах ниже 15 К кривые, рассчитанные с учетом дисперсии (сплошные кривые) и в модели анизотропного континуума (штриховые кривые), практически совпадают: их отличие не превышает 3%. При более высоких температурах различие возрастает, но для рассматриваемого интервала $3 \text{ К} < T < 40 \text{ К}$ оно невелико: при температурах 25 и 40 К теплопроводность, рассчитанная в модели анизотропного континуума оказывается выше, чем при учете дисперсии приблизительно на 5% и 14%, соответственно (см. рис. 3.8). Максимальное влияние дисперсия оказывает на медленную поперечную моду: для неё модель анизотропного континуума дает значения $\kappa(T)$ при $T = 40 \text{ К}$ на 15% больше, чем при учете дисперсии. Значительно меньшее влияние оказывает

дисперсия на продольные фононы и быструю поперечную моду: ее учет приводит к уменьшению теплопроводности при $T = 40$ К на 9% и 12%, соответственно.

На этом же рисунке приведена температурная зависимость полной теплопроводности с учетом дрейфового движения продольных фононов (кривая 4b). Из сравнения этой зависимости с диффузионной теплопроводностью (кривая 4) следует, что максимальное значение дрейфовый вклад достигает в области максимума $\kappa_{[001]}^L(T)$. При $T_{\max}^L = 17$ К он составляет 18%.

Поскольку, сам вклад продольных фононов в полную теплопроводность мал – он составляет 7.6%, то вклад дрейфового движения продольных фононов в полную теплопроводность оказывается пренебрежимо малым – порядка 1%. При увеличении температуры роль продольных фононов уменьшается. Их вклад становится менее 1% при $T = 40$ К, а дрейфовый вклад – на порядок меньше. Итак, дрейфовым движением продольных фононов для кристаллов кремния с натуральным изотопическим составом в рассматриваемом температурном интервале можно пренебречь.

3.4 Анизотропия теплопроводности и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра

Проанализируем угловые зависимости теплопроводности образцов Si с квадратным сечением [17] ($D = 0.293$ см, $L = 2.9$ см) при вращении потока тепла в плоскости грани куба $\{J\} = \{100\}$ и в диагональной плоскости $\{J\} = \{110\}$ (см. формулы (3.3) и (3.4)). Как видно из рисунков 3.9, изменения угловых зависимостей полной теплопроводности и вкладов от каждой из ветвей фононного спектра при увеличении температуры выглядят достаточно любопытно. анизотропия теплопроводности в исследованном интервале обусловлена, главным образом, вкладом медленных поперечных фононов, которые фокусируются в направлениях типа [001] и обеспечивают максимум теплопроводности именно в этом направлении. При низких температурах отклонение теоретических зависимостей от экспериментальных данных не превышает погрешности (4%). Анизотропия полной теплопроводности $\kappa(T)$ при $T = 3$ К максимальна и достигает 50% ($\kappa_{[001]}(3)/\kappa_{[110]}(3) \approx 1.4$, $\kappa_{[001]}(3)/\kappa_{[111]}(3) \approx 1.5$, см. рис. 3.9а, 3.9б). При увеличении температуры до $T_{\max} = 25$ К анизотропия теплопроводности уменьшается (рис. 3.9в, 3.9г), и для экспериментальных данных она составляет 6% ($\kappa_{[001]}^{\text{exp}}(25)/\kappa_{[111]}^{\text{exp}}(25) \approx 1.06$). Хотя отклонение теоретических зависимостей от экспериментальных данных не превышает (5 – 8) %, однако для рассчитанных значений анизотропия достигает 19% ($\kappa_{[001]}(25)/\kappa_{[111]}(25) \approx 1.19$, $\kappa_{[001]}(25)/\kappa_{[110]}(25) \approx 1.15$). Как видно из рисунков 3.9, мы получили вполне удовлетворительное согласие результатов расчета с экспериментом.

Следует отметить, что при вращении градиента температуры в диагональной плоскости мы предварительно разворачиваем образец в плоскости основания на угол $\pi/4$ (относительно случая вращения в плоскости грани куба), чтобы одна из боковых граней образца стала перпендикулярной оси вращения. Поэтому при вращении градиента температуры (образца) в диагональной плоскости направление [001] ($\psi = 0$) соответствует случаю, когда основание образца повернуто в плоскости XU на угол $\pi/4$. Для образцов с квадратным сечением при фиксированном на-

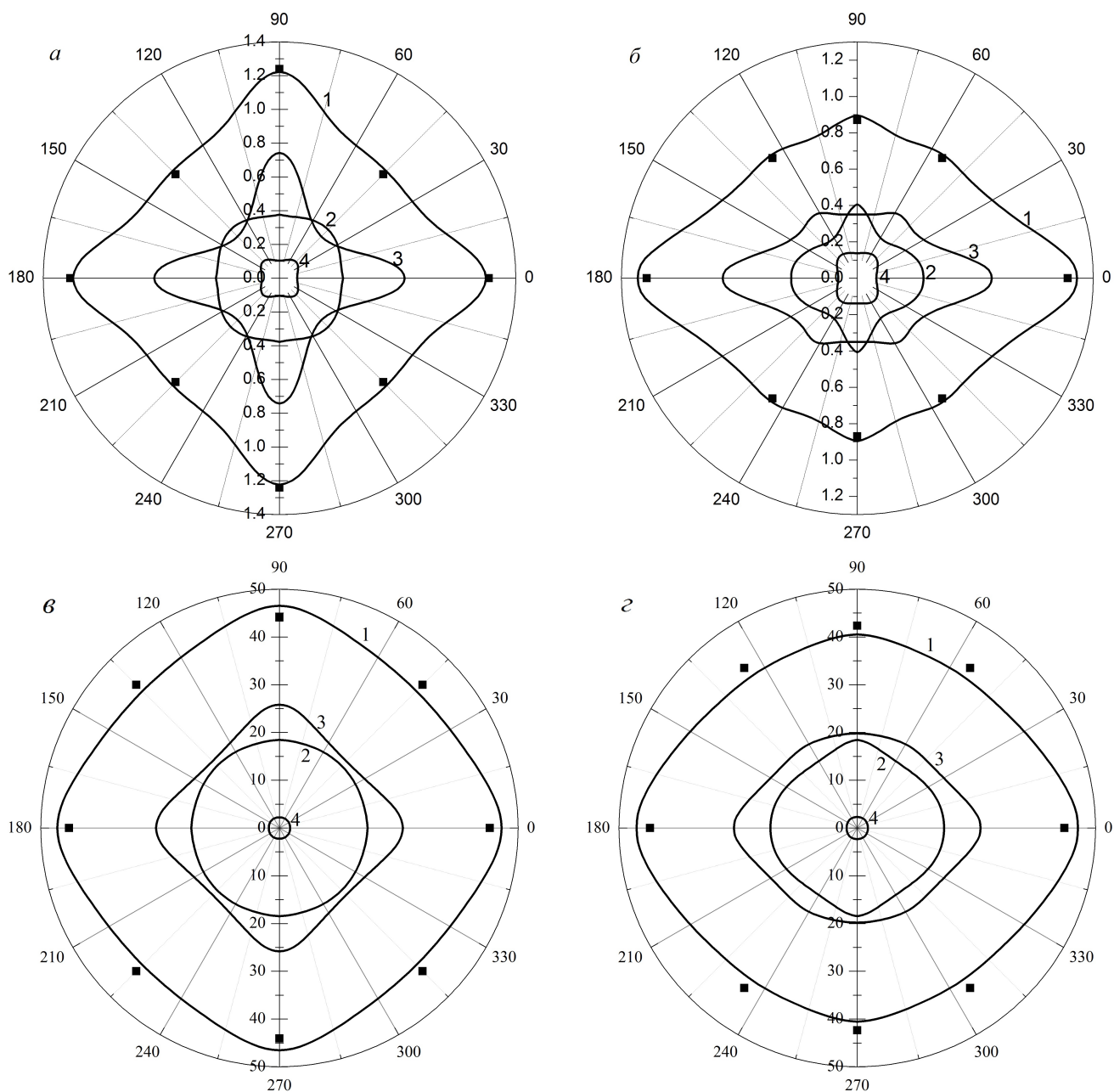


Рисунок 3.9. Угловые зависимости полной теплопроводности $\kappa(\psi)$ ($\text{Вт см}^{-1} \text{К}^{-1}$) (кривые 1) и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра при температурах (а,б) – 3 К, (в,г) – 25 К для образцов с квадратным сечением ($L = 2.9$ см, $D = 0.293$ см): кривые 2 – для быстрой поперечной моды, кривые 3 – для медленной поперечной моды, кривые 4 – для продольной моды; для случаев: (а,в) – ось образца (и градиент температуры) вращается в плоскости грани куба, (б,г) – ось образца вращается в диагональной плоскости. Символы – экспериментальные значения [17].

правлении градиента температуры зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней образца является слабой. Значение теплопроводности $\kappa_{[100]}^{\{110\}}(T)$ при вращении градиента температуры в диагональной плоскости оказывается меньше на 1.3 % значения $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(T)$ при вращении градиента температуры в плоскости грани куба (рис. 3.9а, 3.9в). С другой стороны значения теплопроводности для направления градиента температуры $[110]$ $\kappa_{[110]}^{\{100\}}(T)$ будет равно соответствующим значениям $\kappa_{[110]}^{\{110\}}(T)$.

Для образцов с прямоугольными сечениями при одинаковом направлении градиента температуры зависимость теплопроводности от ориентации боковых граней образца является более существенной (см. рис. 3.10). Так например, для направления градиента температуры [110] при $T = 3$ К теплопроводность образца с широкой гранью {100} и узкой {110} оказалась в 1.3 раза больше, чем для образца с широкой гранью {110} и узкой {100}. Как видно из рисунка 3.10, этот результат достаточно хорошо согласуется с экспериментом [17]. Однако в направлении [100] анизотропия теплопроводности значительно меньше: для образца с широкой гранью {100} теплопроводность на 5% выше, чем для образца с широкой гранью {110}.

Таблица 3.3. Относительные вклады различных ветвей фононного спектра в полную теплопроводность $\tilde{\kappa}_{[J]}^{\lambda}(T) = \kappa_{[J]}^{\lambda}(T)/\kappa_{[J]}(T)$ в симметричных направлениях [J] при температурах $T = 3, 25, \text{ и } 40$ К для образцов с квадратным сечением [17].

$\tilde{\kappa}_{[J]}^{\lambda}(T)$	[100]			[101]			[111]		
	3 К	25 К	40 К	3 К	25 К	40 К	3 К	25 К	40 К
$\tilde{\kappa}_{[J]}^{t_1}$	0.31	0.40	0.43	0.46	0.45	0.46	0.30	0.42	0.44
$\tilde{\kappa}_{[J]}^{t_2}$	0.61	0.55	0.54	0.39	0.49	0.50	0.51	0.52	0.52
$\tilde{\kappa}_{[J]}^L$	0.08	0.05	0.03	0.15	0.06	0.04	0.19	0.06	0.04

Следует отметить, что в рассматриваемой области температур $3 \text{ К} < T < 40 \text{ К}$ доминирующий вклад в теплопроводность вносят поперечные фононы (см. таблицу 3.3). Медленные поперечные фононы фокусируются в направлении [100], и их вклад в этом направлении максимален – при температуре $T = 3$ К он достигает 61% полной теплопроводности, а вклад быстрой поперечной моды в два раза меньше - 31% (см. рис. 3.9a). При увеличении температуры до 40 К для направления [001] вклад медленной поперечной моды уменьшается до 54%, а быстрой поперечной моды возрастает до 43% (см. рис. 3.9a). Для продольных фононов направление [001] соответствует направлению дефокусировки, поэтому их вклад минимален – при $T = 3$ К он составляет 8%. Продольные фононы при низких температурах фокусируются в направлениях [111], и их вклад в этом направлении максимален – при $T = 3$ К он достигает 19% полной теплопроводности (см. в таблицу 3.3). С увеличением температуры в интервале от 3 до 40 К суммарный вклад поперечных фононов возрастает от 92% при $T = 3$ К, до 97% при $T = 40$ К. При этом вклад продольных фононов монотонно уменьшается: для направления [100] от 8% до 3% при $T = 40$ К, а для направления [111] уменьшение более значительно – от 19% до 4% при $T = 40$ К (см. таблицу 3.3). Такое поведение вкладов продольных и поперечных фононов в теплопроводность кремния обусловлено различным влиянием ангармонических механизмов рассеяния. Для продольных фононов в окрестности максимума теплопроводности основную роль играют нормальные процессы рассеяния, тогда как для поперечных – процессы переброса. Поэтому температура максимума теплопроводности для поперечных фононов оказывается на 9 К выше, чем для продольных фононов. Заметим, что переход от граничного к объемным механиз-

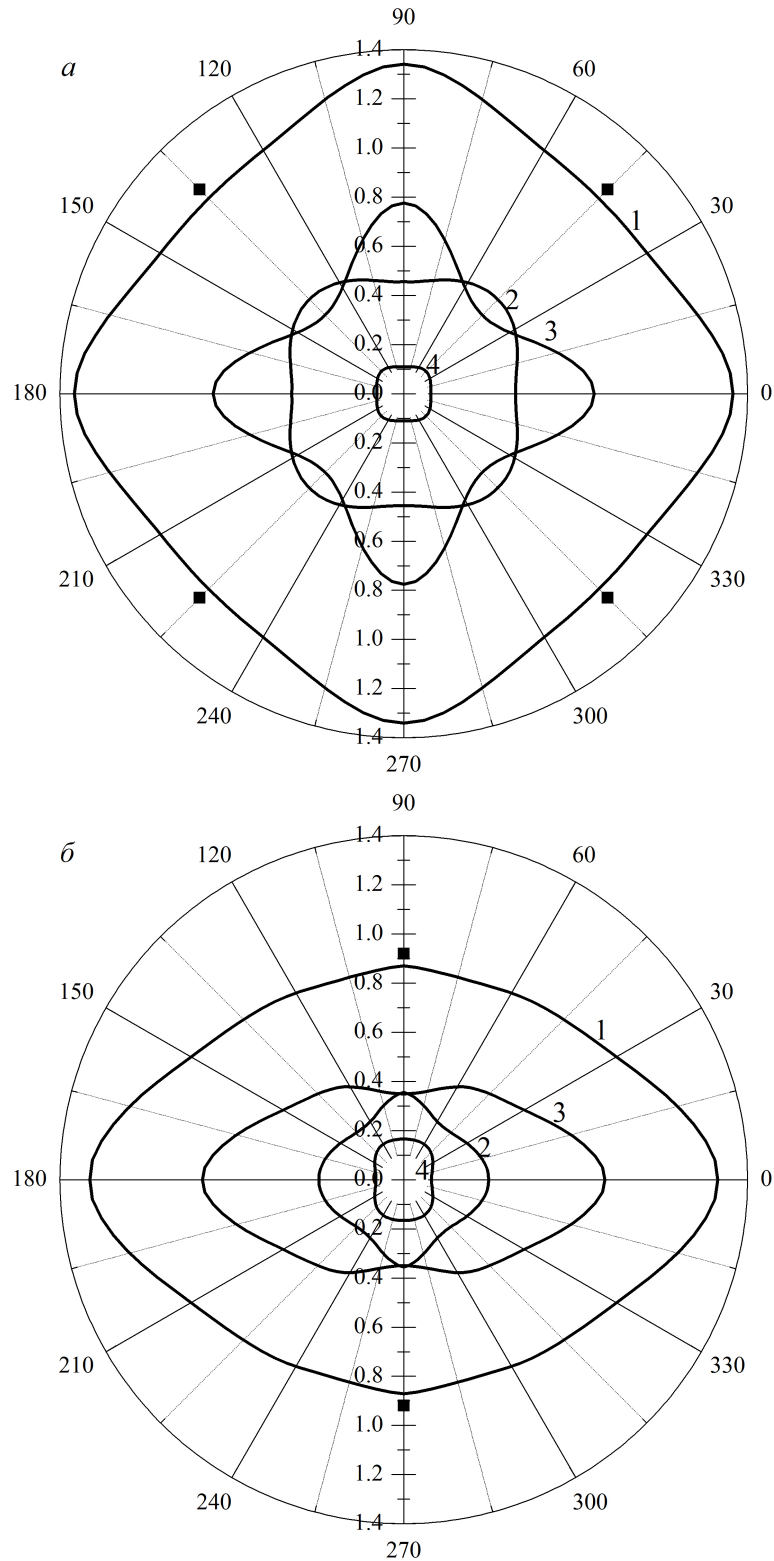


Рисунок 3.10. Угловые зависимости полной теплопроводности $\kappa(\psi)$ ($\text{Вт см}^{-1} \text{ К}^{-1}$) (кривые 1) и вкладов в нее от каждой из ветвей фононного спектра при температуре 3 К для образцов с прямоугольным сечением ($L = 3.5$ см, $D = 0.185$ см и $\mu = 3.45$). (а) – ось образца (и градиент температуры) вращается в плоскости грани куба, (б) – ось образца вращается в диагональной плоскости: кривые 2 – для быстрой поперечной моды, кривые 3 – для медленной поперечной моды, кривые 4 – для продольной моды. Символы – экспериментальные значения [17].

мам релаксации для продольных фононов происходит при $T_B \approx 14$ К, тогда как для поперечных фононов при $T_B \approx 18$ К.

Предложенный метод учета фокусировки фононов и параметры ангармонического рассеяния фононов будут использованы в интерпретации экспериментальных данных по теплопроводности монокристаллических пленок и нанопроводов в следующих главах.

3.5 Выводы

Основные результаты третьей главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Предложен метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов. Этот метод заключается в введении двух ориентационных параметров, которые учитывают зависимость теплопроводности от направления теплового потока и ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла. Показано, что ориентационные параметры определяются через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока.
2. Показано, что использование вычисленных нами времен релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах образцов конечной длины позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния для различных направлений градиента температуры и боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур. Определены параметры ангармонического рассеяния фононов для кристаллов кремния.
3. Анализ вкладов в теплопроводность от различных ветвей фононного спектра показал, что максимальный вклад в анизотропию полной теплопроводности вносят медленные поперечные фононы.

Глава 4

Анизотропия теплопроводности монокристаллических пленок и нанопроводов при низких температурах

В этой главе рассмотрим анизотропию длин свободного пробега фононов монокристаллических пленок и нанопроводов на основе кубических кристаллов в режиме граничного рассеяния.

Используем метод учета фокусировки фононов, сформулированный в главе 3. Предложенный метод является актуальным, поскольку в значительном числе публикаций, посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах, эффекты, связанные с фокусировкой фононов, не учитывались. Так, например, в работах [21, 22, 41] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась теория Казимира [14], справедливая только для модели изотропной среды. А при изложении экспериментальных результатов в обзорах [4, 7, 8] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Нами будет показано, что изменение ориентации плоскости пленки может приводить к изменению значений теплопроводности в 2–3 раза. Следует отметить, что ориентационные зависимости теплопроводности определяются типом анизотропии упругой энергии.

Влияние анизотропии упругой энергии на спектр и вектора поляризации колебательных мод определяется безразмерным параметром $k - 1 = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}) / (c_{11} - c_{44})$ [25] (см. уравнения (1.2), (1.3) и (1.6) в главе 1). В зависимости от знака параметра $k - 1$ все кубические кристаллы могут быть разделены на кристаллы с положительной $k - 1 > 0$ (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) и отрицательной $k - 1 < 0$ (CaF₂, NaCl, YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка (см. Таблицу 4.1). Для изотропных сред параметр $k = 1$. Вид спектра и поведение векторов поляризации колебательных мод для кристаллов первого ($k - 1 > 0$) и второго типа ($k - 1 < 0$) качественно различны (см. подробнее [25]). Проведенный нами анализ показал, что направления фокусировки фононов для каждой из акустических мод в кристаллах одного типа совпадают, тогда как для кристаллов разного типа они отличаются. Причем, как показано в главе 1, направления фокусировки фононов в кристаллах первого типа соответствуют направлениям дефокусировки в кристаллах второго типа и наоборот. Поэтому следует ожидать, что это может

привести к качественному отличию анизотропии теплопроводности наноструктур из кристаллах разного типа.

В настоящей главе (см. также [24]) рассмотрим изменение зависимостей длин свободного пробега фононов от геометрических параметров при изменении параметра $k - 1$ от значений 0.90 (для кристаллов GaAs) к значениям 0.03 (для кристаллов YAG), далее к изотропной среде, для которой $k - 1 = 0$, затем к кристаллам второго типа YIG ($k - 1 = -0.04$) и NaCl ($k - 1 = -0.48$) (см. Таблицу 4.1). Показано, что включение в рассмотрение кристаллов YAG и YIG с малой анизотропией упругой энергии позволяет практически осуществить переход к модели изотропной среды: при уменьшении параметра $|k - 1|$ зависимости длин пробега от геометрических параметров стремятся к значениям, рассчитанным в модели изотропной среды.

Таблица 4.1. Упругие модули второго порядка c_{ij} (10^{12} дин/см²), плотность ρ (г/см³) и параметр анизотропии $k - 1$ для ряда кубических кристаллов.

Кристалл	c_{11}	c_{12}	c_{44}	ρ	$k - 1$
GaAs [50]	1.1904	0.5384	0.5952	5.317	0.90
Ge [44]	1.289	0.483	0.671	5.32	0.87
LiF [51]	1.246	0.424	0.649	2.646	0.78
Si [47]	1.677	0.65	0.804	2.3301	0.67
Алмаз [46]	10.76	1.25	5.76	3.512	0.40
YAG [43]	3.281	1.064	1.137	4.55	0.03
YIG [43]	2.69	1.077	0.764	5.17	-0.04
CaF ₂ [48]	1.74	0.56	0.359	3.211	-0.33
NaCl [45]	0.575	0.099	0.133	2.214	-0.48

При изучении фононного транспорта в наноразмерных образцах важную роль играет исследование зависимости теплопроводности от их геометрических размеров. В работе [22] была проанализирована длина свободного пробега фононов тонких пленок бесконечной длины в модели изотропной среды. Авторы обратили внимание на интересную особенность – в режиме граничного рассеяния длина свободного пробега фононов логарифмически расходится при стремлении ширины пленки к бесконечности. Эта расходимость для модели изотропной среды отмечалась ранее в работе [77]. Однако вопрос о влиянии конечных размеров наноструктур на длины свободного пробега фононов не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости теплопроводности от геометрических параметров пленок, от направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристалла. Решение этих проблем позволяет определить оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов микросхем. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [4, 7, 8].

В разделе 4.1 анализируются длины свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах в режиме граничного рассеяния. В разделе 4.2 исследованы зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров наноразмерных образцов. В разделе 4.3 проанализированы угловые зависимости длин свободного пробега фононов в пленках из кристаллов с различной анизотропией упругой энергией для различных ориентаций плоскостей пленок. Изложение материала настоящей главы основано на работах [24, 78].

4.1 Длины свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах

Проанализируем фононный транспорт в пленках длины L , имеющих прямоугольное сечение со сторонами D (толщина) и $W = \mu D$ (ширина). Исследуем теплопроводность наноразмерных образцов в режиме граничного рассеяния, когда теплосоппротивление обусловлено диффузным рассеянием фононов на границах. Рассмотрим область температур гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), когда применима модель анизотропного континуума. Из выражения для теплопроводности

$$\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = (1/3) C_V(T) \bar{S} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}$$

следует, что анизотропия теплопроводности определяется длиной свободного пробега фононов, поскольку удельная теплоемкость C_V и средняя скорость фонона \bar{S} не зависят от направления потока тепла. Средние длины пробега фононов Λ , а также длины пробега Λ^λ для фононов с поляризацией λ при диффузном рассеянии фононов на границах определены в работах [28, 29] (см. главу 2). С учетом фокусировки фононов для направления потока тепла $[I(\psi)]$ и ориентации широкой грани пленки относительно осей кристалла $\{J\}$ их можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} &= \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sum_{\lambda_1} \langle (S_0^{\lambda_1})^{-2} \rangle} \sum_{\lambda} \int d\Omega_q \frac{I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \\ \Lambda_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}} &= \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{1}{\langle (S_0^\lambda)^{-2} \rangle} \int d\Omega_q \frac{I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)}{(S_0^\lambda(\theta, \varphi))^3}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

где λ - индексы поляризации, $d\Omega_q = \sin\theta d\theta d\varphi$, $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$, θ и φ - угловые переменные вектора \mathbf{q} . В системе координат по ребрам куба фазовые скорости $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ определены формулами (1.4), (1.5). Индекс поляризации L соответствует продольным фононам, а t_1 и t_2 соответствуют «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам. Релаксационные функции $I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$ для пленок с прямоугольным сечением при выполнении неравенств $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ определяются выражениями [29] (см. также главу 2, раздел 2.2):

$$I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \frac{Dk_0 |V_{g3}^\lambda|}{\mu} \left\{ \mu - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{2 |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}. \quad (4.2)$$

Если $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ или $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu$ при $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$, то функции $I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi)$ определяются выражениями для образцов бесконечной длины

$$I_{[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{D}{6\mu} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g1}^\lambda} \right)^2 (3\mu |V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|), & \text{если } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|, \\ \mu \frac{D}{6} \left(\frac{V_{g3}^\lambda}{V_{g2}^\lambda} \right)^2 (3 |V_{g2}^\lambda| - \mu |V_{g1}^\lambda|), & \text{если } \mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|. \end{cases} \quad (4.3)$$

Здесь $V_{g3}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g1}^\lambda(\theta, \varphi)$, $V_{g2}^\lambda(\theta, \varphi)$ - проекции групповой скорости на направление градиента температуры, и стороны D и W , соответственно. Для образцов с квадратным сечением [28] достаточно в формулах (4.2)-(4.3) положить $\mu = 1$.

Проанализируем зависимости длин пробега фононов от геометрических и ориентационных параметров, когда тепловой поток вращается в плоскости пленки для трех случаев: (1) плоскость пленки совпадает с плоскостью грани куба YZ $\{J\} = \{100\}$, (2) плоскость пленки совпадает с диагональной плоскостью $\{J\} = \{110\}$, (3) плоскость пленки перпендикулярна диагонали куба $\{J\} = \{111\}$. Ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через параллельные и перпендикулярные тепловому потоку компоненты групповой скорости. Определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока. Ось «1» (ось вращения) направим перпендикулярно плоскости пленки, она определяет ориентацию плоскости $\{J\}$. Ось «2» направим перпендикулярно двум узким боковым граням пленки. Тогда компоненты групповой скорости фононов V_g^λ для рассматриваемых случаев могут быть представлены в следующем виде (см. (3.5) - (3.7)):

$$\begin{aligned} (1) \quad & V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \\ (2) \quad & V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ & V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}, \\ (3) \quad & V_{g3}^\lambda = (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \cos \psi, \\ & V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \sin \psi, \\ & V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda) / \sqrt{3}. \end{aligned}$$

Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^λ . Проекция групповой скорости V_{g1}^λ не зависит от угла ψ , поскольку, является осью вращения (см. формулы (3.5) - (3.7)). Итак, формулы (4.1)-(4.3) позволяют анализировать особенности фононного транспорта в тонких пленках и нанопроводах при низких температурах. Необходимым условием правомерности такого подхода является применимость модели анизотропного континуума для анализа фононного транспорта в наноразмерных образцах. В работе [6] показано, что для нанопроводов с диаметрами 56 и 115 нм в интервале температур от 20 до 60

К теплопроводность следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому для пленок с толщинами большими 50 нм теория, развитая в этой работе, применима в достаточно широкой низкотемпературной области.

В изотропных средах фазовые скорости фононов S_0^λ не зависят от углов θ и φ . Поэтому из формул (4.1) - (4.3) следует, что длины свободного пробега фононов различных поляризаций равны друг другу и средней длине пробега:

$$\begin{aligned} \Lambda^L = \Lambda^t = \Lambda &= D \frac{3}{4\pi} \int d\Omega_q \tilde{I}(\theta, \varphi), \quad \tilde{I}(\theta, \varphi) = \frac{I^\lambda(\theta, \varphi)}{DS_0^\lambda}, \quad \tilde{I}(\theta, \varphi) = \\ &= k_0 |n_3| \left\{ 1 - \frac{k_0 |n_2| + \mu |n_1|}{2\mu |n_3|} + \frac{(k_0)^2 |n_1| |n_2|}{3\mu (n_3)^2} \right\} \text{ при } \begin{cases} (\mu |n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3/n_1| \geq k_0) \\ \text{или} \\ (\mu |n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3/n_2| \geq k_0/\mu) \end{cases}, \\ \tilde{I}(\theta, \varphi) &= \begin{cases} (n_3/n_1)^2 (3\mu |n_1| - |n_2|) / 6\mu \text{ при } (\mu |n_1| > |n_2| \text{ и } |n_3/n_1| < k_0), \\ (n_3/n_2)^2 (3|n_2| - \mu |n_1|) \mu / 6 \text{ при } (\mu |n_1| < |n_2| \text{ и } |n_3/n_2| < k_0/\mu). \end{cases} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Здесь n_1, n_2 и n_3 – компоненты единичного волнового вектора \mathbf{n} . Как видно из выражений (4.4), длины пробега фононов в изотропных средах не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими параметрами образцов. Однако в упруго анизотропных кристаллах они различны для фононов разных поляризаций и зависят от направления теплового потока в кристалле. Из выражения (4.4) следует результат Смолуховского [79] для длины пробега молекул при течении разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с прямоугольным сечением ($a \times b$):

$$\begin{aligned} \Lambda &= \frac{3}{4} (ab)^{1/2} \left\{ \left(\frac{a}{b}\right)^{1/2} \ln \left[\frac{b}{a} + \sqrt{1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2} \right] + \left(\frac{b}{a}\right)^{1/2} \ln \left[\frac{a}{b} + \sqrt{1 + \left(\frac{a}{b}\right)^2} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} \left[\left(\left(\frac{a}{b}\right)^{3/2} + \left(\frac{b}{a}\right)^{3/2}\right) - \left(\frac{a}{b} + \frac{b}{a}\right)^{3/2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Из формулы (4.5) для кнудсеновского течения фононного газа по бесконечному стержню с прямоугольным сечением ($a = D$ и $b = W = \mu D$) мы получаем результат МакКарди и др. [17] для длины Казимира

$$\Lambda_C = \frac{3D}{4} \left\{ \ln \left[\mu + \sqrt{1 + \mu^2} \right] + \mu \ln \left[\mu^{-1} + \sqrt{1 + \mu^{-2}} \right] + \frac{1}{3} \left[(\mu^{-1} + \mu^2) - \mu^{1/2} (\mu^{-1} + \mu)^{3/2} \right] \right\}. \quad (4.6)$$

Для теплопроводности цилиндрического стержня бесконечной длины с диаметром d в модели изотропной среды следует результат Казимира [14]: $\Lambda_C = d$, что совпадает с результатом Кнудсена [13] для течения разреженного молекулярного газа по бесконечной трубе с круглым сечением. Эти совпадения не является случайным. Займан в монографии [12] (стр. 415) подчеркнул: «Эти рассуждения (как, впрочем, и вся теория рассеяния на границах) точно такие же, как и в случае потока сильно разреженного газа через трубку (Кнудсен [344], Смолухов-

ский [615])». Поэтому режим граничного рассеяния получил название кнудсеновского течения фононного газа [13].

4.2 Зависимости длин свободного пробега фононов от геометрических параметров пленок и нанопроводов с различным типом анизотропии упругой энергии

Рассмотрим особенности фононного транспорта в монокристаллических пленках при низких температурах. Прежде, чем переходить к анализу влияния упругой анизотропии наноразмерных образцов на длины пробега фононов, отметим, что для их оценок в монокристаллических пленках кубической симметрии, как правило, использовалась теория Казимира и модель изотропной среды [21, 22, 41]. В качестве примера можно привести работу [41], в которой сделана попытка определить длины пробега фононов в тонких пленках и нанопроводах при низких температурах, исходя из результатов Казимира и соображений размерности. Авторы [41] предполагали, что длина пробега фононов в пленке зависит только от ее толщины, а цилиндрический стержень, рассмотренный Казимиром, является одномерной системой. Поскольку для цилиндрического стержня длина Казимира $\Lambda_C = 1 \cdot D$ (где D – диаметр стержня), а пленка является двумерной структурой, то авторы [41] постулировали, что для теплового потока вдоль пленки длина Казимира равна удвоенной толщине $\Lambda_C = 2 \cdot D$ (где D – толщина пленки), т.е. она не зависит ни от ширины, ни от длины пленки. Эти результаты использовались в [41] для анализа температурных зависимостей теплопроводности в кремниевых пленках и нанопроводах. В связи с этим «результатом» в работе Мариса и Тамуры [22] была рассмотрена теплопроводность тонких пленок бесконечной длины в модели изотропного континуума и указано на ошибочность этого результата. Было показано, что длины Казимира не только существенным образом зависят от ширины пленки, но и, более того, они логарифмически расходятся при стремлении ширины пленки к бесконечности. Эта расходимость для пленок в модели изотропной среды отмечалась ранее в работе [77]. Действительно, из формулы (4.6) следует результат [22, 77]

$$\tilde{\Lambda}_C(\mu) = \Lambda_C(\mu) / D \cong A + B \ln \mu, \quad \mu \gg 1, \quad A \approx 0.90, \quad B = 0.75, \quad (4.7)$$

где $\Lambda_C(\mu)$ – длина Казимира для пленки толщиной D и шириной μD . Как отмечалось в [22, 77], логарифмическая расходимость (4.7) обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Вопрос о влиянии конечной длины пленки на логарифмическую расходимость длин Казимира в работах [22, 77] не рассматривался. Также не исследовались такие важные проблемы, как влияние упругой анизотропии кубических кристаллов на зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров пленок и от направлений теплового потока. Эти проблемы являются актуальными для полупроводниковых пленок, широко используемых в микроэлектронике [4, 6–9, 19, 21].

Численный анализ теплопроводности с использованием выражений (4.1) – (4.3) показал, что длины Казимира для монокристаллических пленок также логарифмически расходятся, когда ши-

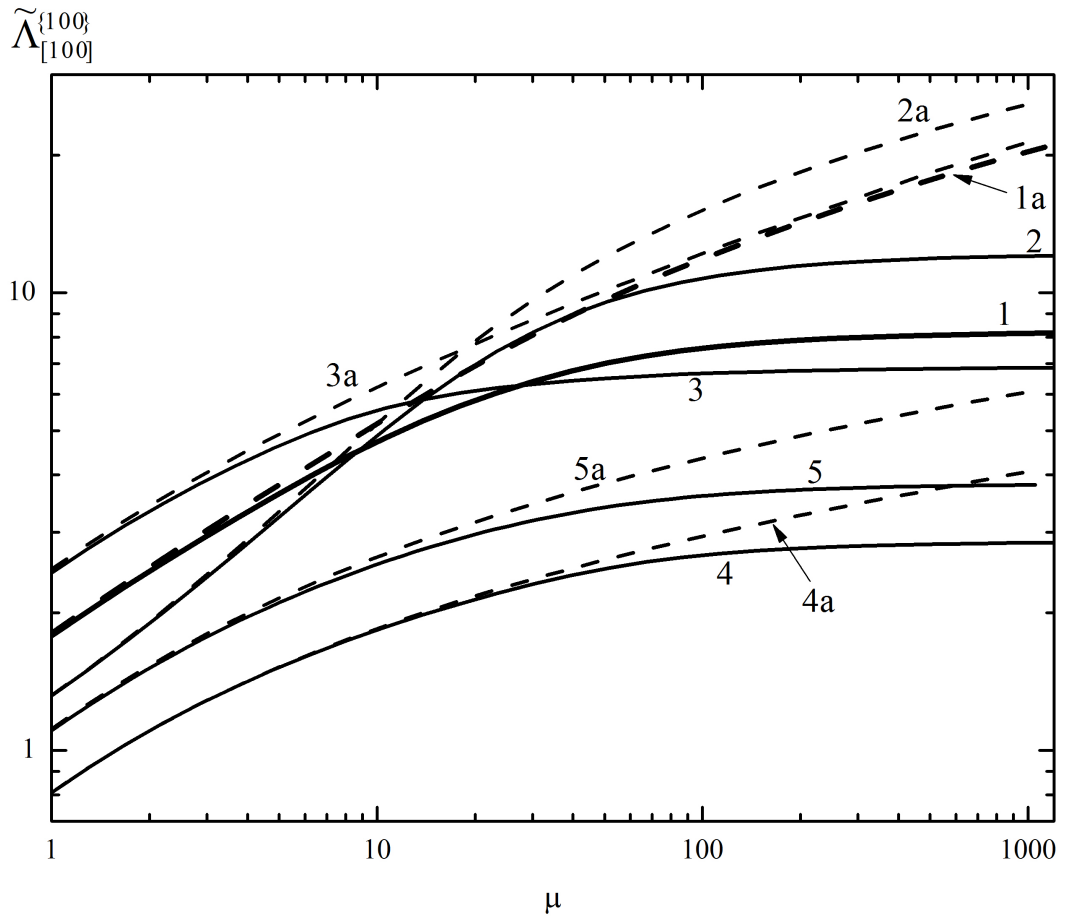


Рисунок 4.1. Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ (кривые 1 и 1a), а также длин пробега фононов различных поляризаций $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\lambda\{100\}}(\mu)$ в пленках германия от приведенной ширины. Сплошные кривые (1, 2, 3, 4, 5) соответствуют длинам пробега фононов в наноразмерных образцах с параметрами $L = 100D$, $D = 50$ нм. Пунктирные кривые (1a, 2a, 3a, 4a, 5a) соответствуют длинам Казимира. Кривые (2, 2a) — для быстрой поперечной моды, (3, 3a) — для медленной поперечной моды, (4, 4a) — для продольной моды. Кривые (5, 5a) относятся к модели изотропной среды, кривая 5a — результат Мариса и Тамуры [22] для длины Казимира.

рина пленки стремится к бесконечности. Однако их значения для фононов различных поляризаций в отличие от изотропной среды значительно различаются (см. рис. 4.1). Кривая 5a на этом рисунке соответствует результату Мариса и Тамуры [22] для длины Казимира в модели изотропной среды. Для нанопроводов с квадратным сечением длины Казимира в значительной степени определяются эффектом фокусировки фононов. Как видно из таблицы 4.2, они достигают максимальных значений в направлениях фокусировки фононов. В этих направлениях они превышают длины пробега остальных колебательных мод, а также значение для изотропной среды $\tilde{\Lambda}_{C_{iso}} \cong 1.115$. Так, например, для Ge: $\tilde{\Lambda}_{C_{[111]}}^L = 1.48$, $\tilde{\Lambda}_{C_{[110]}}^{t1} = 1.85$ и $\tilde{\Lambda}_{C_{[100]}}^{t2} = 2.49$. Длины Казимира достигают минимальных значений в направлениях дефокусировки, в которых они оказываются заметно меньше, чем для изотропных сред, например для Ge: $\tilde{\Lambda}_{C_{[100]}}^L = 0.81$, $\tilde{\Lambda}_{C_{[111]}}^{t1} = 0.77$ и $\tilde{\Lambda}_{C_{[110]}}^{t2} = 0.89$. При переходе к нанопроводам из кристаллов второго типа направления фокусировки и дефокусировки фононов и, соответственно, минимальные и максимальные значения длин пробега меняются местами. Например, для NaCl минимальные значения $\tilde{\Lambda}_{C_{[111]}}^l = 0.86$, $\tilde{\Lambda}_{C_{[100]}}^{t1} = 0.81$ и $\tilde{\Lambda}_{C_{[100]}}^{t2} = 0.94$ имеют место в тех направлениях, где для Ge имели

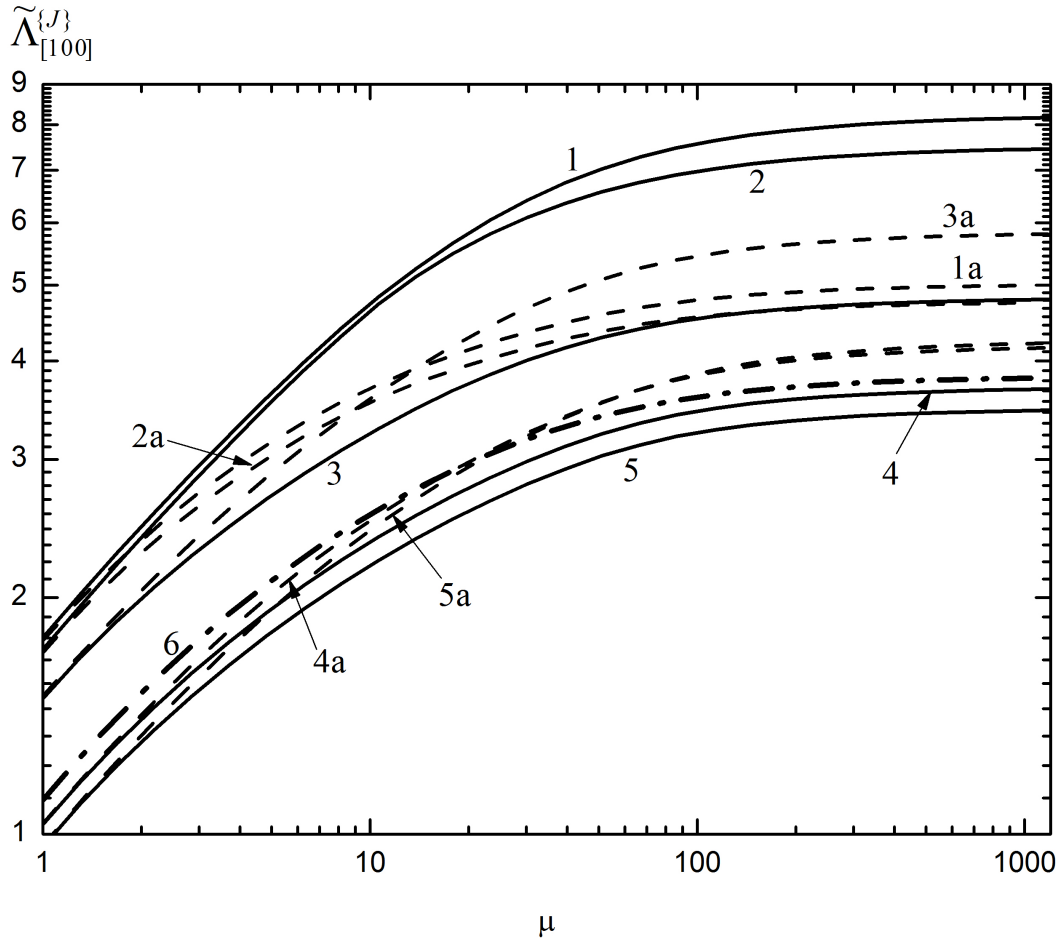


Рисунок 4.2. Зависимости средних длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{J\}}(\mu)$ от приведенной ширины в наноструктурах с параметрами $L = 100D$, $D = 50$ нм для направления градиента температур $[100]$. Сплошные кривые (1, 2, 3, 4, 5) соответствуют ориентации $\{J\} = \{100\}$. Пунктирные кривые (1a, 2a, 3a, 4a, 5a) – для ориентации $\{J\} = \{110\}$. Кривые (1, 1a) – Ge, (2, 2a) – GaAs, (3, 3a) – алмаз, (4, 4a) – NaCl, (5, 5a) – CaF₂. Кривая 6 относится к модели изотропной среды.

место максимальные. При этом для NaCl максимальные значения $\tilde{\Lambda}_{C[100]}^l = 1.91$, $\tilde{\Lambda}_{C[110]}^{t_1} = 1.72$ и $\tilde{\Lambda}_{C[111]}^{t_2} = 1.77$ реализуются в направлениях, где для Ge имели место минимумы длин свободного пробега фононов.

Следует учесть, что в кристаллах первого и второго типа поперечные моды t_1 и t_2 также меняются местами [25]. Отметим, что для нанопроводов с существенной анизотропией упругой энергии (GaAs, Ge, LiF, Si) значения минимальных и максимальных длин Казимира существенно отличаются от величины $\tilde{\Lambda}_{Ciso}$. Однако для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k - 1| \ll 1$) они близки к значениям $\tilde{\Lambda}_{Ciso}$ (см. Таблицу 4.2). При этом для каждой моды в зависимости от направления они могут быть как больше, так и меньше значения $\tilde{\Lambda}_{Ciso}$. Как видно из таблицы 4.2, наши результаты для длин Казимира согласуются с полученными в [17], в пределах погрешности 1-4 %. Для изотропных сред длины свободного пробега в режиме граничного рассеяния определяются полностью геометрическими параметрами наноразмерных образцов. Поэтому они могут быть использованы в качестве удобной системы сравнения для длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ в упруго анизотропных кристаллах при изменении направления

теплового потока или при сравнении длин пробега в наноразмерных образцах, выполненных из различных материалов (см. рис. 4.1, 4.2).

Длины Казимира для монокристаллических пленок определяются не только геометрическими параметрами, но и в значительной степени зависят от ориентации теплового потока и плоскости пленки, т. е. $\tilde{\Lambda}_C(\mu) \Rightarrow \tilde{\Lambda}_{C[I]}^{\{J\}}(\mu)$. В предельном случае $\mu \gg 1$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{C[I]}^{\{J\}}(\mu)$ могут быть представлены в виде (4.7). При этом значения коэффициентов А и В становятся зависящими от параметров $[I(\psi)]$ и $\{J\}$. Как видно из рисунка 4.1, учет конечной длины приводит к устранению расходимости длин пробега, как в изотропных, так и в монокристаллических пленках. При фиксированной длине $L = 100D$ и толщине пленки $D = 50$ нм интервал интенсивного роста длин свободного пробега фононов с увеличением ширины пленки $W = \mu D$ ограничены ее длиной. При значениях $W > 10L$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ выходят на насыщение (см. рис. 4.1 и 4.2).

Проанализируем зависимости теплопроводности пленок для кристаллов первого и второго типа от ориентации боковых граней наноразмерных образцов $\{J\}$. Для этого фиксируем направление градиента температуры $[I] = [100]$ и рассмотрим зависимости теплопроводности от приведенной ширины пленки $\mu = W/D$ при $L/D = 100$ ($k_0 = 50$) для двух ориентаций плоскости пленки $\{J\} = \{100\}$ и $\{J\} = \{110\}$. Как видно из рисунка 4.2, отличие сплошных и пунктирных линий для средних длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ при $\mu = 1$ составляет менее 3%. Поэтому для нанопроводов с квадратным сечением ($\mu = 1$) зависимости теплопроводности от ориентации боковых граней для всех рассмотренных кристаллов малы, и ими можно пренебречь. Однако в достаточно широких монокристаллических пленках значения длин пробега фононов в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки. Следует отметить, что для ориентации плоскости пленки $\{J\} = \{100\}$ и направления градиента температуры $[I] = [100]$ длины пробега в кристаллах первого типа больше, чем в изотропных средах, а в кристаллах второго типа – меньше (см. рис. 4.2). Причем, в монокристаллических пленках из кристаллов первого типа с существенной анизотропией упругой энергии (LiF, GaAs, Ge, Si) значения $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ для ориентации $\{J\} = \{100\}$ растут значительно быстрее с увеличением ширины пленки μ , чем $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для $\{J\} = \{110\}$ (см. рис. 4.2). При переходе от нанопроводов ($\mu = 1$) к широким пленкам с $\mu = 100$ и $\{J\} = \{100\}$ полная теплопроводность и длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают в 4.39, 4.06, 4.25, 4.40, 3.03, 3.08 раза, соответственно. Для ориентации $\{J\} = \{110\}$ в этом случае рост менее значителен: длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают в 2.73, 2.68, 2.72, 2.72, 3.63, 3.24 раза, соответственно. Отношения теплопроводностей $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu)/\kappa_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ для пленок Ge с ориентациями $\{J\} = \{100\}$ и $\{J\} = \{110\}$ при $\mu = 10$ и $\mu = 100$ равны 1.3 и 1.6, соответственно. Для алмазных пленок ситуация качественно отличается. Для них, в отличие от пленок из кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ при $\{J\} = \{100\}$ с увеличением ширины пленки μ возрастают медленнее, чем для $\{J\} = \{110\}$ (см. рис. 4.2). Поэтому при $\mu = 100$ отношение $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(100)/\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100) = 0.83$, т.е. становится меньше единицы. Для наноразмерных образцов из кристаллов второго типа CaF₂ и NaCl зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(\mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)$ мало отличаются от зависимостей $\tilde{\Lambda}_{iso}(\mu)$. При $\mu = 1$ их значения для обеих ориентаций $\{J\}$ меньше,

Таблица 4.2. Нормированные длины Казимира $\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^\lambda$ и $\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$ в стержнях с квадратным сечением для симметричных направлений $[I(\psi)]$.

Соединение	$k - 1$	$[I(\psi)]$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^L$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{t_1}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}^{t_2}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$	$\tilde{\Lambda}_{C[I(\psi)]}$ [17]
GaAs	0.90	[100]	0.80	1.34	2.29	1.74	-
		[110]	1.25	1.73	0.89	1.25	-
		[111]	1.52	0.77	1.20	1.09	-
Ge	0.87	[100]	0.81	1.32	2.49	1.80	-
		[110]	1.24	1.85	0.89	1.29	-
		[111]	1.48	0.77	1.24	1.11	-
LiF	0.78	[100]	0.82	1.30	2.64	1.86	1.80
		[110]	1.22	1.93	0.89	1.33	1.28
		[111]	1.44	0.78	1.27	1.11	1.10
Si	0.67	[100]	0.84	1.30	2.75	1.92	1.86
		[110]	1.22	1.97	0.89	1.34	1.29
		[111]	1.42	0.78	1.26	1.10	1.09
Алмаз	0.40	[100]	0.93	1.18	2.11	1.53	1.55
		[110]	1.17	1.32	0.96	1.14	1.11
		[111]	1.27	0.86	1.40	1.17	1.13
YAG	0.03	[100]	1.09	1.12	1.16	1.13	-
		[110]	1.12	1.13	1.08	1.11	-
		[111]	1.13	1.04	1.25	1.15	-
YIG	-0.04	[100]	1.14	1.00	1.10	1.06	-
		[110]	1.10	1.18	1.09	1.13	-
		[111]	1.09	1.05	1.49	1.25	-
CaF ₂	-0.33	[100]	1.59	0.78	0.95	0.97	0.98
		[110]	1.04	1.86	0.98	1.33	1.30
		[111]	0.92	1.13	1.86	1.46	1.45
NaCl	-0.48	[100]	1.91	0.81	0.94	1.03	1.05
		[110]	1.01	1.72	0.99	1.26	1.23
		[111]	0.86	1.19	1.77	1.42	1.43

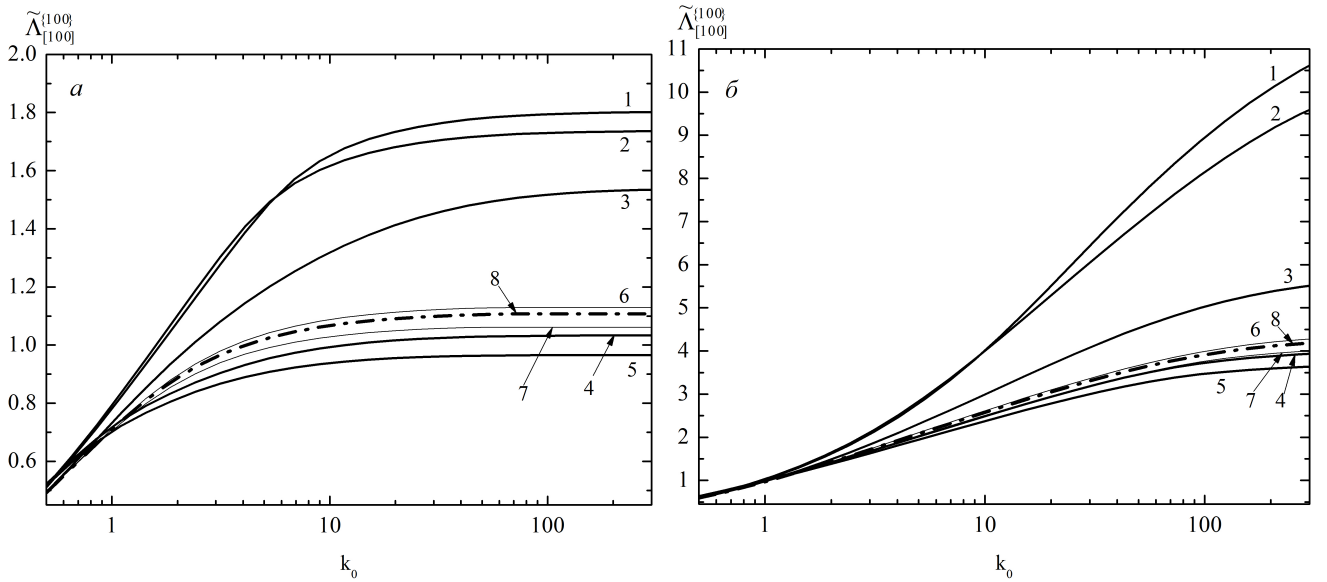


Рисунок 4.3. Зависимости приведенных длин свободного пробега фононов от параметра k_0 для градиента температуры в направлении $[100]$ и ориентации плоскости пленки $\{100\}$ в монокристаллических нанопроводах (а) и пленках (б) на основе Ge, GaAs, алмаз, NaCl, CaF₂, YAG и YIG — сплошные кривые 1, 2, 3, 4, 5, 6 и 7, соответственно. Штрихпунктирные кривые 8 относятся к модели изотропной среды.

чем для изотропной среды в 1.15 и 1.07 раза для CaF₂ и NaCl, соответственно. При увеличении ширины пленки длины пробега возрастают, причем, для $\{J\} = \{100\}$ они остаются меньше, чем $\tilde{\Lambda}_{iso}(100)$ на 11% и 4% для CaF₂ и NaCl, соответственно. Однако для ориентации плоскости пленки $\{110\}$ они возрастают быстрее, и при $\mu = 100$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100)$ для CaF₂ и NaCl становятся больше, чем $\tilde{\Lambda}_{iso}(100)$ на 7%.

Рассмотрим зависимости длин свободного пробега фононов, нормированных на толщину пленки, от приведенной длины пленки $k_0 = L/2D$. Сравним эти зависимости для нанопроводов ($\mu = 1$) и достаточно широких пленок с $\mu = 100$. С увеличением длины наноразмерного образца величины теплопроводности и длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[J]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ возрастают тем быстрее, чем больше ширина пленки и чем больше анизотропия упругой энергии кристалла (см. рис. 4.3 и Таблицу 4.1). Так, например, при увеличении параметра L/D от 1 до 100 величины теплопроводности и длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, \mu)$ в нанопроводах ($\mu = 1$) из кристаллов первого типа LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают в 3.59, 3.31, 3.49, 3.69, 3.02 и 2.29 раза, соответственно. Для кристаллов второго типа CaF₂, NaCl, YIG рост значительно меньше: длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, 1)$ возрастают соответственно в 1.85, 1.98 и 2.16 раза. Для широких пленок ($\mu = 100$) рост оказывается значительно больше: значения $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, 100)$ при увеличении параметра L/D от 1 до 100 для кристаллов первого типа LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG возрастают соответственно в 13.61, 11.62, 12.58, 13.98, 7.68 и 6.22 раза. Для кристаллов второго типа CaF₂, NaCl, YIG значения длин пробега в этом случае возрастают в 5.16, 5.48 и 5.92 раза, соответственно. Отметим, что для кристаллов YAG и YIG со слабой анизотропией упругой энергии ($|k - 1| \ll 1$) зависимости $\tilde{\Lambda}_{[J]}^{\{J\}}(k_0, \mu)$ и $\tilde{\Lambda}_{iso}(k_0, \mu)$ от k_0 мало отличаются друг от друга (см. рис. 4.3). При длинах пленок, превышающих их ширину на два порядка величины, зависимости длин пробега фононов выходят на насыщение. Обращает на себя внимание качественное отличие зависимо-

стей $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{100\}}(k_0, \mu)$ для пленок и нанопроводов при $k_0 > 1$. Для пленок с плоскостью $\{100\}$ и направлением теплового потока $[100]$ значения длин свободного пробега в кристаллах первого (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) оказываются выше, чем в изотропных средах, как в тонких пленках, так и в нанопроводах (см. рис. 4.3). Тогда, как для кристаллов второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) в этом случае они оказываются ниже, чем в изотропных средах.

4.3 Анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах двух типов

В этом разделе проанализируем угловые зависимости теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)$ и средних длин пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ при вращении градиента температуры в плоскости пленок для различных ориентаций. Поскольку теплопроводность $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) = (1/3) C_V(T) \bar{S} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}$, то при фиксированной температуре их зависимости от угла ψ отличаются только постоянным множителем $(1/3) C_V(T) \bar{S}$. Определим ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения длин пробега фононов (и теплопроводностей). Сначала рассмотрим изменение анизотропии средних длин свободного пробега фононов при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам. Затем проанализируем изменение анизотропии длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ для различных ориентаций плоскостей пленок относительно осей кристаллов и сравним с результатами, следующими из модели изотропной среды. Длины пробега $\tilde{\Lambda}_{iso}(k_0, \mu)$ изотропны и определяются полностью геометрическими параметрами. Здесь они используются в качестве системы сравнения для длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ в различных упруго анизотропных наноразмерных образцах. Как видно из рисунков 4.4 - 4.6, угловые зависимости длин свободного пробега фононов в монокристаллических наноразмерных образцах при вращении теплового потока в плоскостях $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ значительно отличаются, как друг от друга, так и от рассчитанных в модели изотропной среды. Для кристаллов одного типа угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ для всех направлений теплового потока и рассмотренных ориентаций плоскостей пленок качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии. Поэтому на рисунках 4.4 - 4.6 мы привели угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ только для двух кристаллов первого типа Ge и алмаза и одного кристалла второго типа - CaF₂.

Рассмотрим анизотропию фононного транспорта в нанопроводах. Для кристаллов первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si, алмаз, YAG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа $[100]$ и обеспечивается медленной поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 4.4, 4.5). В направлениях $[110]$ и $[111]$ угловые зависимости теплопроводности и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(1)$ имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной и продольной модами, соответственно (см. рис. 4.4, 4.5). При вращении теплового потока в плоскости $\{100\}$ длины пробега фононов в нанопроводах $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(1)$ для кристаллов первого типа оказываются выше, чем для изотропной среды $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$. В плоскости $\{110\}$

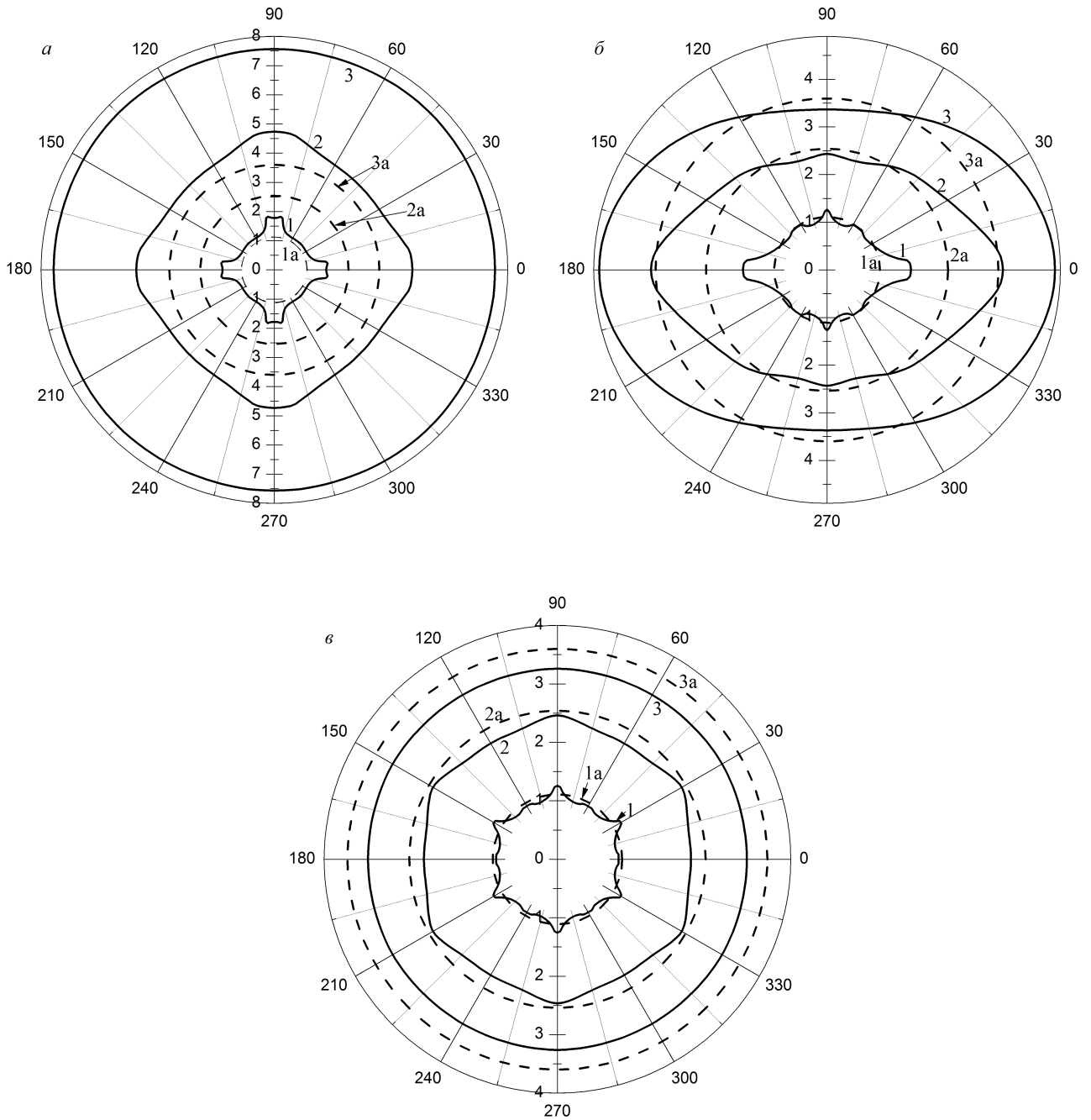


Рисунок 4.4. Угловые зависимости длин свободного пробега $\tilde{\Lambda}_{[l(\psi)]}^{\{J\}}$, нормированных на толщину D , для наноразмерных монокристаллических образцов Ge длиной $L = 100D$ для случаев, когда градиент температур вращается в плоскости пленки: (а) – $\{100\}$, (б) – $\{110\}$ и (в) – $\{111\}$. Кривые (1, 1а), (2, 2а) и (3, 3а) рассчитаны для значений параметра $\mu = 1, 10$ и 100 , соответственно. Кривые (1, 2, 3) рассчитаны в модели анизотропного континуума, штриховые кривые (1а, 2а, 3а) – в модели изотропной среды.

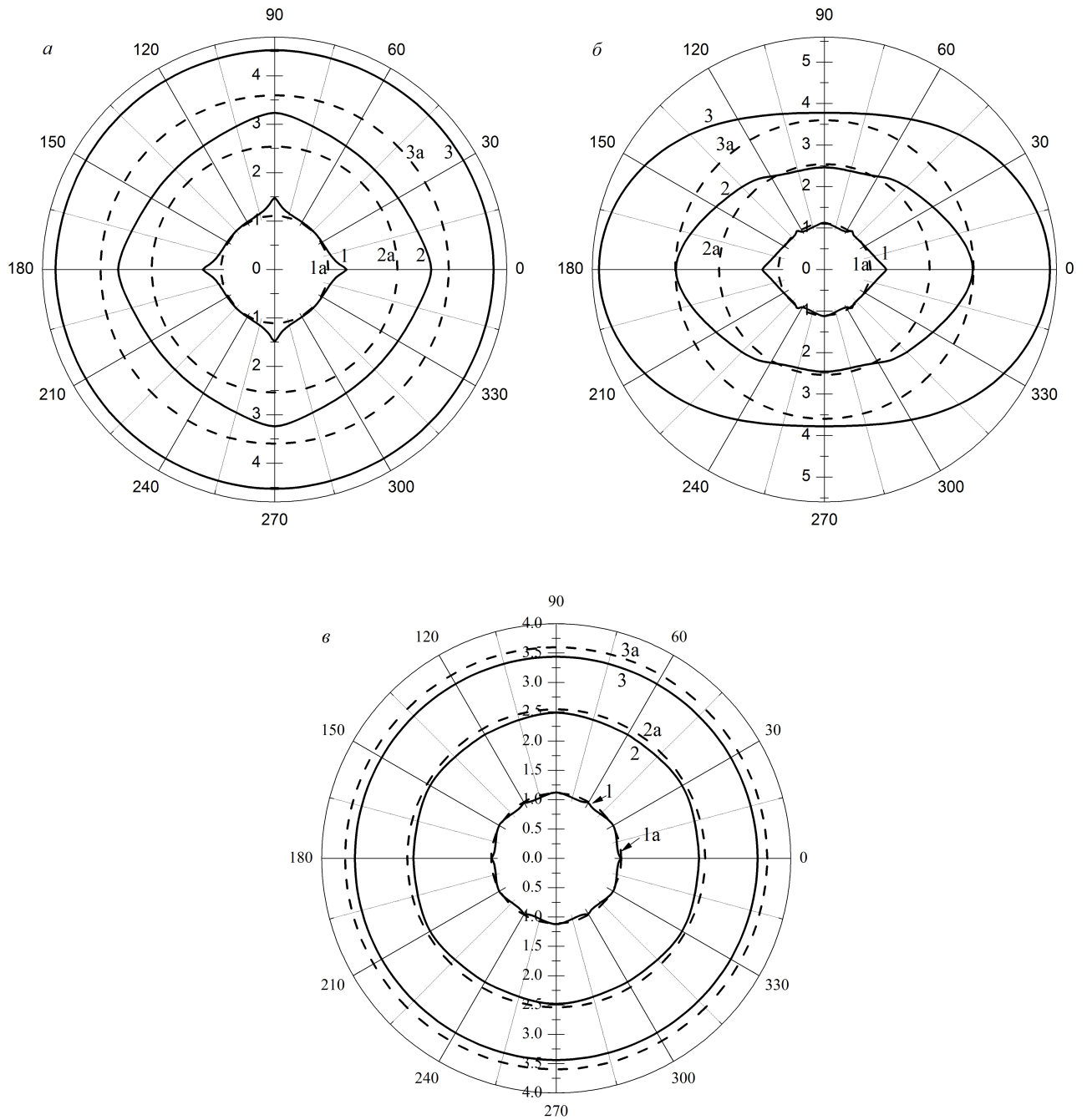


Рисунок 4.5. То же, что на рис. 4.4 для наноразмерных монокристаллических алмазных образцов.

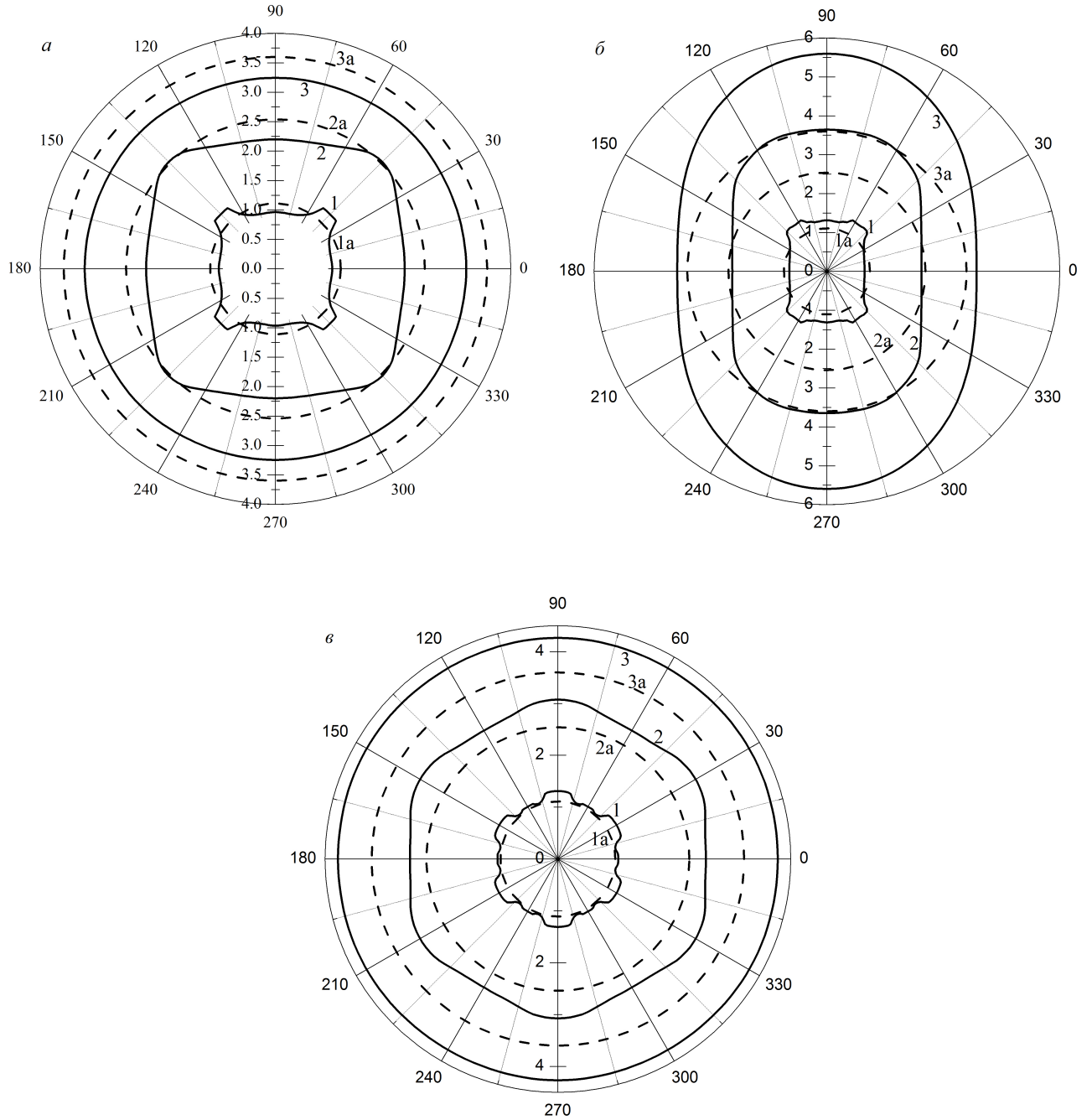


Рисунок 4.6. То же, что на рис. 4.4 для наноразмерных монокристаллических образцов CaF_2 .

длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(1)$ для кристаллических нанопроводов первого типа имеют большие значения, чем величина $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$ только для направлений теплового потока близких к [100] и [110]. В плоскости {111} длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(1)$ в широком интервале углов ψ оказываются меньше, чем в изотропной среде (см. рис. 4.4в, 4.5в). Однако для направлений близких к [110] они превышают значения для изотропных сред. В противоположность этому, для кристаллических нанопроводов второго типа (CaF₂, NaCl, YIG) максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа [110] и обеспечивается быстрой поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 4.6). Для направлений [111] и [100] угловые зависимости теплопроводности и длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(1)$ имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой медленной поперечной и продольной модами, соответственно. В плоскости {100} длины пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(1)$ для нанопроводов на основе кристаллов второго типа оказываются ниже, чем в изотропных средах $\tilde{\Lambda}_{iso}(1)$, за исключением направлений теплового потока близких к [110] (см. рис. 4.6). В плоскости {111} длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(1)$ в широком интервале углов ψ оказываются больше, чем в изотропных средах, за исключением направлений близких к [110].

Как видно из рисунков 4.4 - 4.6, рост ширины пленок приводит к увеличению длин свободного пробега и к качественному изменению их угловых зависимостей $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ по сравнению с нанопроводами. Для пленок с плоскостями {100} и {111} при $\mu = 100$ они становятся почти изотропными для кристаллов обоих типов, хотя при $\mu = 10$ небольшая анизотропия еще остается (см. рис. 4.4а, 4.4в, 4.5а, 4.5в). Причем, в кристаллах первого типа для пленок с ориентацией {100} длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ больше, чем в изотропных средах, однако для ориентации {111} ситуация обратная – для всех направлений длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ меньше, чем в изотропной среде. В пленках из кристаллов второго типа угловые зависимости длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(\mu)$ качественно отличаются. Для них выполняются обратные неравенства: для ориентации {100} при $\mu = 100$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$ для всех углов ψ меньше, а величины $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ – больше, чем в изотропных средах. Для плоскости {110} угловые зависимости $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в достаточно широких пленках принимают эллипсоидальный вид. Причем, в кристаллах первого типа с длинной осью вдоль направления [100], а в кристаллах второго типа – вдоль направления [110] (см. рис. 4.4б – 4.6б). Отношения длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(\mu)/\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ для пленок с плоскостью {110} при $\mu = 100$ для кристаллов LiF, GaAs, Ge, Si, алмаза и YAG составляют 1.45, 1.39, 1.42, 1.50, 1.44 и 1.03, соответственно. В кристаллах первого типа LiF, GaAs, Ge, Si YAG длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в плоскости {110} оказываются меньше, чем в плоскости {100} при всех углах ψ . Однако для алмазных пленок в направлениях близких к [100] длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100)$ оказываются больше, чем $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100)$, тогда как для направлений близких к [110] ситуация обратная. Причем, длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100)$ для алмазных пленок с ориентацией $\{J\} = \{110\}$ оказываются больше, чем в изотропных средах при всех углах ψ (см. рис. 4.5б). В противоположность этому, для кристаллов первого типа LiF, GaAs, Ge, Si в области углов $-(\pi/3) < \psi < (\pi/3)$ длины пробега $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100) > \tilde{\Lambda}_{iso}(100)$, тогда как вне этого интервала $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(100) < \tilde{\Lambda}_{iso}(100)$. Следует отметить, что максимальные значения теплопроводности при $\mu = 100$ в кристаллах первого типа LiF, GaAs, Ge, Si и YAG достигаются для ориентации пленки {100}, а минимальные

– для ориентации пленки $\{111\}$ (см. рис. 4.4б). В противоположность этому для ориентации пленки $\{100\}$ длины пробега в кристаллах второго типа CaF_2 , NaCl , YIG имеют минимальные значения. Максимальные значения теплопроводности для них при $\mu = 100$ достигаются для ориентации пленки $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$. При этом отношения длин пробега $\tilde{\Lambda}_{[100]}^{\{110\}}(100)/\tilde{\Lambda}_{[110]}^{\{110\}}(100)$ в кристаллах CaF_2 , NaCl , YIG составляют 0.69, 0.77 и 0.94, соответственно.

Итак, нами показано, во-первых, что в наноразмерных образцах из кристаллов с положительной ($k - 1 > 0$) и отрицательной ($k - 1 < 0$) анизотропией упругих модулей второго порядка не только спектр и вектора поляризации [25], но и анизотропия длин свободного пробега фононов качественно отличаются. Во-вторых, угловые зависимости теплопроводности и длин свободного пробега фононов для кристаллов обоих типов качественно изменяются при переходе от нанопроводов к достаточно широким пленкам. В-третьих, для получения максимальных значений теплопроводности в кристаллах первого типа LiF , GaAs , Ge , Si и YAG необходимо использовать пленки с плоскостью $\{100\}$, а для получения минимальных значений – пленки с плоскостью $\{111\}$. Для алмазных пленок максимальные значения теплопроводности при $\mu = 100$ достигаются для плоскости $\{110\}$, в направлении $[100]$, а минимальные значения – для пленок с плоскостью $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности в пленках из кристаллов второго типа CaF_2 , NaCl , YIG при $\mu = 100$ достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$, а минимальные – для ориентации плоскости пленки $\{100\}$.

Результаты проведенного нами анализа показывают, что при интерпретации экспериментальных результатов по теплопроводности тонких пленок необходимо указывать направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно осей кристалла. Отсутствие такой информации в [4, 7, 8] существенно затрудняет использование их для сравнения с результатами теоретических исследований.

4.4 Выводы

Рассмотрены особенности фононного транспорта в монокристаллических пленках и нанопроводах, полученных из кристаллов с положительной (LiF , GaAs , Ge , Si алмаз и YAG) и отрицательной (CaF_2 , NaCl и YIG) анизотропией упругих модулей второго порядка при низких температурах в рамках метода Казимира–МакКарди [14, 17]. Проанализированы зависимости длин пробега фононов от геометрических параметров, а также от направлений теплового потока и ориентаций боковых граней наноразмерного образца для двух типов кристаллов.

Основные результаты четвертой главы можно сформулировать следующим образом:

1. Для изотропных сред длины свободного пробега фононов разных поляризаций совпадают и равны средней длине свободного пробега. Они не зависят от упругих модулей, а определяются полностью геометрическими параметрами. Поэтому являются удобной системой сравнения для длин пробега фононов в упруго анизотропных наноразмерных образцах.
2. В упруго анизотропных наноразмерных образцах длины пробега фононов разных поляризаций различны и существенно зависят не только от их геометрических параметров, но

и от направлений теплового потока и ориентации боковых граней. Для нанопроводов с квадратным сечением величины теплопроводности и длин пробега фононов определяются, главным образом, направлением теплового потока, а их зависимость от ориентации боковых граней мала. Однако в достаточно широких пленках величины теплопроводности в значительной степени определяются ориентацией плоскости пленки.

3. Анизотропия теплопроводности и длин свободного пробега фононов в нанопроводах и тонких пленках из кристаллов первого и второго типа качественно отличается. Угловые зависимости длин пробега для всех направлений теплового потока и ориентаций плоскостей пленок для кристаллов одного типа качественно подобны, отличаясь только большей или меньшей степенью анизотропии.
4. В монокристаллических нанопроводах первого типа направления фокусировки фононов соответствуют направлениям дефокусировки для нанопроводов из кристаллов второго типа. Поэтому длины пробега фононов в монокристаллических нанопроводах первого типа достигают максимальных значений в тех направлениях, в которых они имеют минимальные значения для кристаллов второго типа и наоборот.
5. Определены ориентации плоскостей монокристаллических пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальные или минимальные значения теплопроводности в плоскости пленок. В кристаллах первого типа (LiF, GaAs, Ge, Si и YAG) для получения максимальных значений теплопроводности в плоскости пленок необходимо использовать пленки с плоскостью $\{100\}$, а для получения минимальных значений - пленки с плоскостью $\{111\}$. Для алмазных пленок максимальные значения теплопроводности достигаются для плоскости $\{110\}$ в направлении $[100]$, а минимальные значения – для пленок с плоскостью $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности в пленках на основе кристаллов второго типа (CaF₂, NaCl и YIG) достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$, а минимальные - для ориентации плоскости пленки $\{100\}$.
6. Учет конечной длины пленки приводит к устранению логарифмической расходимости длин Казимира при стремлении ширины пленки к бесконечности, как в изотропных средах, так и в упруго анизотропных материалах. Интервал интенсивного роста длин пробега фононов с увеличением ширины пленки ограничен ее длиной. При значениях ширины пленки, в 10 раз превосходящих её длину, зависимости длин пробега фононов выходят на насыщение.

Глава 5

Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов и пленок

В настоящей главе рассмотрим фононный транспорт в кремниевых нанопроводах и пленках в трехмодовой модели Каллавея [31–34] в рамках стандартного релаксационного метода [1,35,36]. Проведем анализ температурных зависимостей теплопроводности кремниевых нанопроводов и пленок для различных направлений теплового потока и ориентаций боковых граней, экспериментально исследованные в работах [5,6,9,10].

В работах [5,6,9,10] были измерены температурные зависимости теплопроводности монокристаллических кремниевых нанопроводов с диаметрами от 22 до 115 нм в интервале от 20 до 300 К и кремниевых пленок с толщинами от 1.6 до 0.02 мкм в интервале от 17 до 350 К. Для кремниевых нанопроводов с диаметрами большими 50 нм и пленок с толщинами большими 0.02 мкм в интервале температур от 20 до 60 К теплопроводность следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому для кремниевых наноразмерных образцов с указанными поперечными размерами может быть использован фононный спектр для объемных кристаллов Si (1.16).

Теплопроводность кремниевых пленок, измеренная в работах [5,9,10], интерпретировалась в модели изотропной среды согласно теории Фукса и Зондгеймера [80,81]. В этой теории предполагалось, что пленка является двумерной структурой, и её теплопроводность зависит только от одного параметра - толщины пленки. В значительном числе публикаций [5,6,9,10,22,41], посвященных исследованию фононного транспорта в пленках и нанопроводах, эффекты, обусловленные фокусировкой фононов, не учитывались. Так, например, в работах [22,41] для граничного рассеяния в наноструктурах на основе кремния и алмаза использовалась теория Казимира [14], справедливая только для модели изотропной среды. А при изложении экспериментальных результатов в обзорах [4,7,8], а также в работах [5,6,9,10], не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей.

Поэтому в настоящей главе при описании температурных зависимостей теплопроводности кремниевых нанопроводов и пленок учтем фокусировку фононов и используем времена релак-

сации фононов при рассеянии на границах образцов, рассчитанные в работах [28, 29] (см. также главу 2), а также параметры ангармонического рассеяния, найденные для объемных кристаллов Si [30] (см. также главу 3). Покажем, что при учете фокусировки фононов изменение ориентации кремниевой пленки может приводить к изменению значений теплопроводности более, чем в 2 раза. Далее будет видно, что отсутствие информации об ориентации создает определенные трудности при интерпретации результатов эксперимента [5, 9, 10].

Исследуем вклады граничного рассеяния и объемных механизмов релаксации фононов в теплосопротивление (теплосопротивление — величина, обратная коэффициенту теплопроводности) и определим температуры перехода от граничного рассеяния фононов к объемным механизмам релаксации. Проанализируем влияние дисперсии тепловых фононов на температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов и пленок. Определим оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от элементов кремниевых микросхем как при низких, так и при комнатных температурах.

В разделе 5.1 рассчитаны температурные и угловые зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов. В разделе 5.2 проанализированы температурные зависимости и анизотропия теплопроводности кремниевых пленок. Изложение материала настоящей главы основано на работах [11, 82, 83].

5.1 Фононный транспорт в кремниевых нанопроводах

В этом разделе проанализируем температурные зависимости теплопроводности кремниевых цилиндрических нанопроводов [6] с диаметрами $D = 115$ нм и $D = 56$ нм, длиной $L = 3$ мкм в интервале температур от 20 до 300 К. Экспериментальные исследования, проведенные в работе [6], показали, что теплопроводность для нанопроводов с диаметрами 56 нм и 115 нм в интервале температур от 20 до 60 К следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$, как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при расчете теплопроводности этих нанопроводов, может быть использован фононный спектр для объемных кристаллов Si. Очевидно, что при анализе теплопроводности наноразмерных образцов в интервале от 20 до 300 К необходимо учитывать дисперсию спектра и изменение направлений фокусировки при переходе от длинноволновых фононов к коротковолновым. Для учета дисперсии спектр тепловых фононов, определенный из данных по неупругому рассеянию нейтронов для симметричных направлений [58], аппроксимируется полиномом седьмой степени по приведенному волновому вектору фонона x ($x = q/q_{\max}$, q_{\max} — максимальный волновой вектор). При экстраполяции спектра на всю зону Бриллюэна, используется разложение по кубическим гармоникам (см. подробнее [27, 40], а также раздел 1.2). Эта аппроксимация сохраняет кубическую симметрию и позволяет анализировать изменение фокусировки фононов при переходе от длинноволнового $x \ll 1$ к коротковолновому пределу ($x \sim 1$). В длинноволновом пределе $x \ll 1$ она переходит в модель анизотропного континуума, в которой анизотропия спектра определяется фазовой скоростью $S_0^\lambda(\theta, \varphi)$ (см. формулы (1.4), (1.5)).

5.1.1 Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов

Решеточная теплопроводность кремниевых нанопроводов, как и объёмных кристаллов кремния, анализируется в трехмодовой модели Каллавея с выделением вкладов диффузионного и дрейфового движения фононов (см. Приложение А). Полную теплопроводность [31–34] можно представить в виде аддитивной суммы этих вкладов (см. Приложение А):

$$\begin{aligned}\kappa_{diff[I(\psi)]} &= \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 (z^{\lambda})^2 x^2}{\nu_{[I(\psi)]}^{\lambda} \operatorname{sh}^2(z^{\lambda}/2)} dx, \\ \kappa_{dr[I(\psi)]}^{(1)} &= \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{(1)}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\lambda}.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Обозначения приведены в приложении А. В отличие от образцов с квадратным и прямоугольным сечением, рассмотренных в Главе 3, в нанопроводах с круглым поперечным сечением теплопроводность зависит только от одного ориентационного параметра $[I]$ – направления потока тепла относительно осей кристалла. В полную скорость релаксации фононов $\nu_{[I(\psi)]}^{\lambda}(q)$ дают вклад резистивные $\nu_{R[I(\psi)]}^{\lambda}(q)$ и нормальные $\nu_N^{\lambda}(q)$ процессы релаксации фононов. нормальные процессы обуславливают дрейфовый вклад в теплопроводность (см. Приложение А). В качестве резистивных процессов рассеяния рассматривается рассеяние фононов на изотопическом беспорядке $\nu_{iso}^{\lambda}(q)$, границах образца $\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(q)$ и в процессах фонон-фононного переброса $\nu_U^{\lambda}(q)$. Скорости релаксации фононов $\nu_{iso}^{\lambda}(q)$, $\nu_U^{\lambda}(q)$ и $\nu_N^{\lambda}(q)$ определены формулами (3.8) – (3.12).

Скорость релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах цилиндрических образцов определяется кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, граница между которыми определяется параметром $\Delta^{\lambda}(\psi, x, \theta, \varphi) = (L/4R) V_{g\perp}^{\lambda} / |V_{g3}^{\lambda}|$, который зависит от соотношения между компонентами групповой скорости и геометрическим параметром $k_0 = L/2D$. При условии $\Delta^{\lambda}(\psi, x, \theta, \varphi) \leq 1$ скорость релаксации имеет вид (см. раздел 2.2)

$$\begin{aligned}\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi) &= \frac{3\pi V_{g\perp}^{\lambda}}{4D} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left[\left(1 + (\Delta^{\lambda})^2 \right) \sqrt{1 - (\Delta^{\lambda})^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - (\Delta^{\lambda})^2} \right)^3 - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \Delta^{\lambda} \left(\arccos \Delta^{\lambda} + \Delta^{\lambda} \sqrt{1 - (\Delta^{\lambda})^2} \right) \right] \right\}^{-1},\end{aligned}\quad (5.2)$$

а при выполнении противоположного неравенства $\Delta^{\lambda}(\psi, x, \theta, \varphi) > 1$

$$\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = (3\pi V_{g\perp}^{\lambda}) / 4D.\quad (5.3)$$

Рассмотрим вращение потока тепла (оси образца) в диагональной плоскости куба $\{110\}$. Пусть угол ψ задает отклонение потока тепла от оси Z , направленной по ребру куба. Тогда, как следует из (2.47), проекции групповой скорости на направление градиента температуры V_{g3}^{λ} и

перпендикулярное ему $V_{g\perp}^\lambda$ имеют вид

$$V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g\perp}^\lambda = \sqrt{(V_g^\lambda)^2 - (V_{g3}^\lambda)^2}.$$

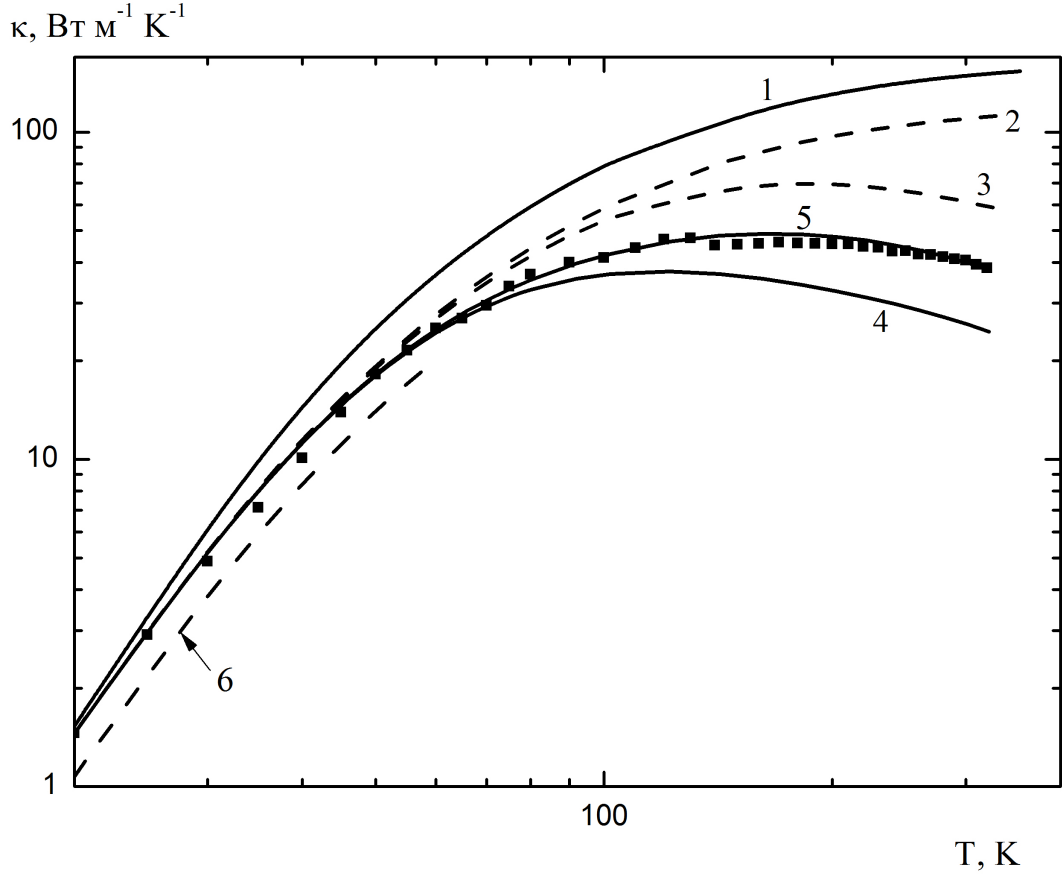


Рисунок 5.1. Температурные зависимости теплопроводности нанопровода с $D = 115$ нм, $L = 3$ мкм и $P = 0.15$ для направления градиента температуры $[111]$ при включении различных механизмов рассеяния фононов: кривая 1 – режим граничного рассеяния $\nu = \tilde{\nu}_{B[111]}^\lambda$, кривая 2 – $\nu = \tilde{\nu}_{B[111]}^\lambda + \nu_{iso}$, кривая 3 – $\nu = \tilde{\nu}_{B[111]}^\lambda + \nu_{iso} + \nu_U$, кривая 4 – вклад диффузионного движения – $\kappa_{dif[111]}(T)$, кривая 5 – полная теплопроводность, кривая 6 – режим граничного рассеяния при $P = 0$ ($\nu = \nu_{B[111]}^\lambda$). Символы \blacksquare – экспериментальные данные [6].

Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость, параметр $\Delta^\lambda(\psi, x, \theta, \varphi)$, а также скорости релаксации $\nu_{B[I(\psi)]}^\lambda$ в формулах (5.2) и (5.3) зависят не только от углов ψ, θ, φ , но и от приведенного волнового вектора фонона x . Как видно из формул (5.2) и (5.3), зависимости теплопроводности от ориентации градиента температуры относительно осей кристалла $[I(\psi)]$ определяются величинами компонент групповой скорости фононов $V_{g3}^\lambda(\psi)$ и $V_{g\perp}^\lambda(\psi)$, которые входят непосредственно в теплопроводность и в скорости релаксации $\nu_{B[I(\psi)]}^\lambda$.

Следует отметить, что при измерении температурных зависимостей теплопроводности [17] объёмные образцы кремния предварительно обрабатывались наждаком для того, чтобы обеспечить диффузное рассеяние фононов границами. Диффузный характер рассеяния фононов реализуется, если геометрические параметры шероховатостей на границе образца будут больше или сравнимы с длиной волны фонона [15, 16, 35]. Для наноразмерных образцов такая процедура

Таблица 5.1. Параметры ангармонического фонон-фононного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке для кристаллов Si^{nat} .

$A_N^L, \text{K}^{-5} \text{c}^{-1}$	$A_N^t, \text{K}^{-5} \text{c}^{-1}$	$A_U^L, \text{K}^{-3} \text{c}^{-1}$	$A_U^{t_1}, \text{K}^{-3} \text{c}^{-1}$	$A_U^{t_2}, \text{K}^{-3} \text{c}^{-1}$	C_U^L, K	C_U^t, K
0.8	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^3$	$1.80 \cdot 10^3$	$0.70 \cdot 10^3$	310	98

технически невозможна. Поэтому учтем частичную зеркальность отражения фононов от границ нанопроводов. Учет её производится обычным образом [1, 15, 16, 35]:

$$\tilde{\nu}_{B[I(\psi)]}^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{(1 - P)}{(1 + P)} \nu_{B[I(\psi)]}^\lambda(\theta, \varphi). \quad (5.4)$$

Для иллюстрации влияния различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов в различных температурных интервалах на рисунке 5.1 приведены результаты расчета при включении различных механизмов рассеяния фононов. В низкотемпературной области теплопроводность следует зависимости $\kappa(T) \sim T^3$. Однако для полностью диффузного рассеяния фононов на границах нанопровода теоретическая кривая (кривая б) идет на 26% ниже экспериментальных данных. Учет зеркальности отражения ($P = 0.15$) позволяет согласовать результаты расчета теплопроводности с данными эксперимента. Учет граничного и изотопического рассеяния дает возможность согласовать результаты расчета для нанопроводов диаметрами 115 и 56 нм с экспериментальными данными в интервале температур от 20 до 60 К с точностью до 4% без использования подгоночных параметров (см. рис 5.1, кривая 2). Ниже параметр $P = 0.15$ используется нами во всех расчетах, приведенных на рисунках 5.1 – 5.6. Как видно из рисунка 5.1, при температурах выше 60 К значительную роль в теплосопrotвлении играют ангармонические процессы рассеяния. В этих расчетах за основу мы взяли параметры ангармонических процессов рассеяния, найденные ранее для объемных кристаллов Si в работе [30] (см. также таблицу 3.2). Для этих параметров нам удалось согласовать результаты расчета температурных зависимостей теплопроводности объемных кристаллов Si с прямоугольным и квадратным сечениями с экспериментальными данными [17] для различных направлений градиента температуры и боковых граней образцов [30] в интервале температур 3 – 40 К. Следует отметить, этот интервал захватывает фактически только область максимума теплопроводности объемных образцов. Он является слишком узким для точного определения параметров ангармонического рассеяния в кристаллах Si. Поэтому при анализе теплопроводности кремниевых нанопроводов в интервале 20 – 300 К следовало ожидать, что параметры ангармонизма могут быть уточнены. Для лучшего согласия результатов расчета с данными [6] мы уточнили частоту релаксации фононов в процессах переброса для быстрой поперечной моды, увеличив параметр $A_U^{t_1}$ (см. таблицу 3.2 и таблицу 5.1). С другой стороны, для наноразмерных образцов величины теплопроводности в температурном интервале 20 – 300 К значительно слабее зависят от параметров ангармонизма (чем в объёмных материалах) из-за более существенной роли граничного рассеяния (см. далее).

Рассмотрим вклад дрейфового движения фононов в теплопроводность от различных ветвей фононного спектра для кремниевых нанопроводов с диаметрами 56 и 115 нм в интервале температур от 20 до 300 К. Для поперечных фононов диффузионный вклад в теплопроводность во всем температурном интервале значительно превосходит вклад дрейфового движения (см. рис. 5.2). Для продольных фононов при $T < 60$ К дрейфовый вклад в теплопроводность $\kappa_{dr}^{(1)L}(T)$ значительно меньше диффузионного. Однако в интервале температур от 100 до 300 К для продольных фононов доминируют нормальные процессы фонон-фононного рассеяния, и дрейфовый вклад в теплопроводность $\kappa_{[111]dr}^{(1)L}(T)$ значительно превосходит диффузионный $\kappa_{[111]dif}^L(T)$ (см. рис. 5.2). Вклад дрейфового движения фононов в полную теплопроводность при $T = 100$ К составляет 13% и 9% для нанопроводов с диаметрами $D = 115$ и 56 нм, а при $T = 300$ К он достигает 35%. Как видно из рисунка 5.2, учет $\kappa_{[111]dr}^{(1)L}(T)$ позволяет согласовать результаты расчета с экспериментальными данными [6] во всем исследованном интервале температур. Вклад дрейфового движения поперечных фононов на порядок меньше, чем $\kappa_{[111]dr}^{(1)L}(T)$, и им можно пренебречь. Из сравнения кривых 1 и 7 на рис. 5.2а видно, что анизотропия теплопроводности в кремниевых нанопроводах при низких температурах значительно больше, чем для объемных стержней: для нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм она составляет 69% и 74%, соответственно. Для объемных стержней кремния при $T = 3$ К, согласно [17], она достигает 50%. С повышением температуры анизотропия уменьшается как для нанопроводов, так и для объемных стержней. Причем, для нанопроводов при $T = 300$ К до 19%, а для объемных стержней при $T = 40$ К она сравнивается с погрешностью эксперимента [17] – 4%.

Роль различных ветвей фононного спектра в теплопроводности нанопроводов с ростом температуры значительно изменяется. Эти изменения обусловлены как дисперсией тепловых фононов, так и дрейфовым движением продольных фононов. Как видно из рисунка 5.2, при низких температурах $T < 30$ К доминирующий вклад в теплопроводность вносит медленная поперечная мода $\kappa^{t_2}(T)$. При $T = 20$ К ее вклад составляет 49% и в два раза превосходит вклад быстрой моды. Однако с повышением температуры вклад быстрой поперечной моды $\kappa^{t_1}(T)$ возрастает значительно быстрее, чем вклад медленной моды $\kappa^{t_2}(T)$, и при $T > 30$ К значения $\kappa^{t_1}(T)$ становятся больше, чем $\kappa^{t_2}(T)$ (см. рис. 5.2). Поэтому во всем интервале температур от 30 до 300 К доминирующий вклад в теплопроводность вносит быстрая поперечная мода. Замедление роста вклада $\kappa^{t_2}(T)$ с повышением температуры связано с сильной дисперсией моды t_2 . Наличие протяженных плоских участков в коротковолновом спектре медленной поперечной моды при $q_{max}/2 < q < q_{max}$ (см. Главу 1, рис. 1.4) приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к значительному уменьшению вклада $\kappa^{t_2}(T)$ с повышением температуры. Вклад продольных фононов в теплопроводность при $T = 20$ К значительно меньше вкладов поперечных фононов. Он составляет 19%. Однако с повышением температуры этот вклад быстро возрастает за счет дрейфового движения и при $T > 65$ К становится больше вклада медленной поперечной моды. При $T = 190$ К вклад $\kappa^L(T)$ достигает максимума и составляет 36% полной теплопроводности.

На рисунке 5.3 приведен расчет температурных зависимостей полной теплопроводности (кривые 1, 2) и ее диффузионной части (кривая 3) в режиме объемных механизмов релакса-

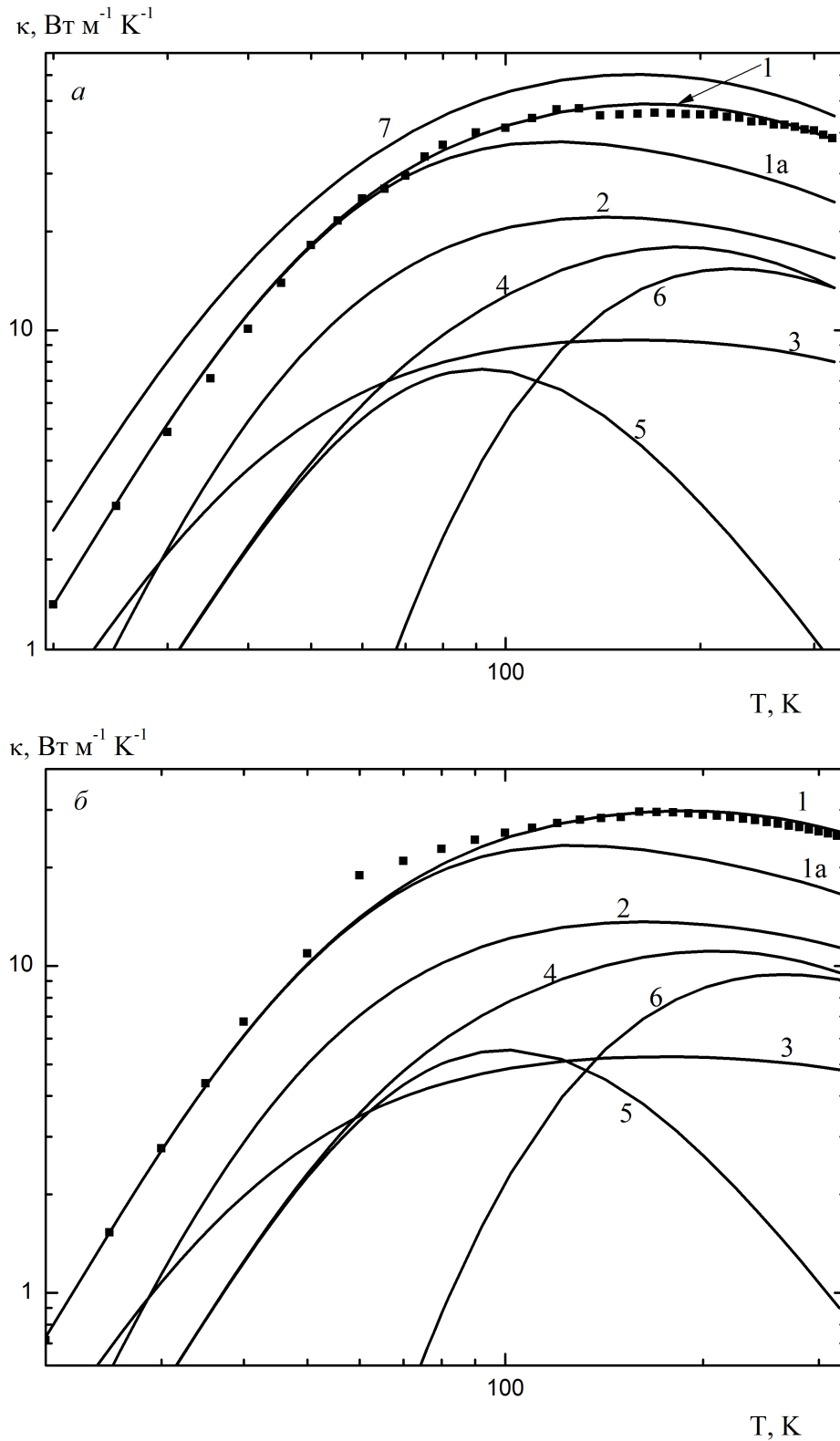


Рисунок 5.2. Температурные зависимости теплопроводности для направления градиента температуры [111] и параметров нанопроводов: (а) диаметр $D = 115$ нм и (б) диаметр $D = 56$ нм. Кривые 1 – полные теплопроводности, кривые 1а – диффузионные вклады, кривые 2 – вклады быстрых поперечных мод, кривые 3 – вклады медленных поперечных мод, кривые 4 – вклады продольных мод, кривые 5 – диффузионные вклады продольных мод, кривые 6 – вклады дрейфового движения фононов. На рисунке (а) кривая 7 – полная теплопроводность для направления [100]. Символы ■ – экспериментальные данные [6].

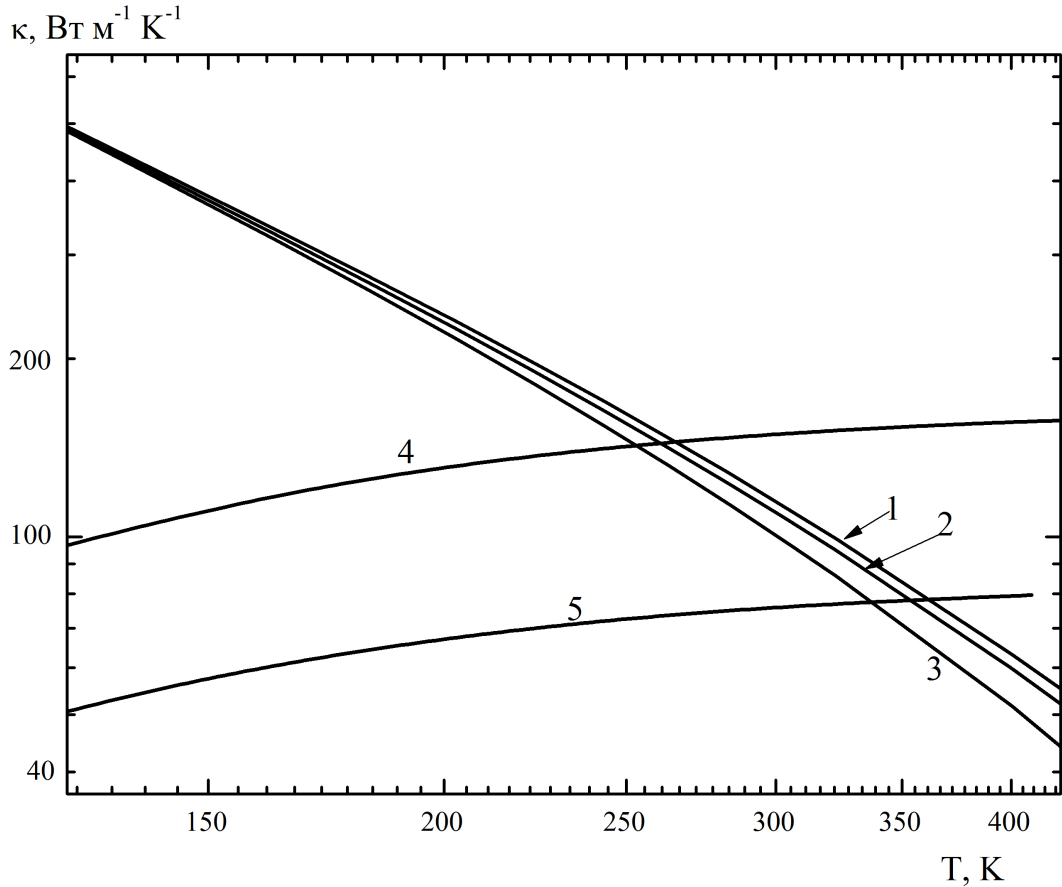


Рисунок 5.3. Температурные зависимости теплопроводности нанопроводов в направлении [111] для объемных механизмов релаксации фононов с учетом дрейфа фононов для нанопроводов с $D = 115$ нм и $D = 56$ нм (кривые 1 и 2), кривая 3 – вклад диффузионного движения в теплопроводность. Кривые 4, 5 - теплопроводность в режиме граничного рассеяния фононов для нанопроводов с $D = 115$ нм и $D = 56$ нм, соответственно.

ции фононов ($\nu = \nu_{iso} + \nu_U + \nu_N$). Пересечение этих кривых с зависимостями теплопроводности в режиме граничного рассеяния фононов (рис. 5.3, кривые 3, 4) дает температуры перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации T_{BV} . При этой температуре длины свободного пробега для граничного рассеяния $\Lambda_{B[I(\psi)]}$ и для объемных механизмов Λ_V сравниваются, и граничное рассеяние обеспечивает 50% полного теплосопrotivления. Численный анализ показал, что для кремниевых нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм при учете только диффузионной части теплопроводности температуры перехода T_{BV} составляют 252 и 337 К, соответственно. При учете вклада дрейфового движения фононов в объемную часть теплопроводности эти температуры возрастают до 265 и 353 К, соответственно. Причем, при комнатной температуре для нанопроводов с диаметрами 56 и 115 нм вклад граничного рассеяния в теплосопrotivление составляет соответственно 60% и 42%.

Как видно из рисунка 5.4, при комнатной температуре значения теплопроводности нанопроводов конечной длины $L = 3$ мкм при $D < L$ существенно возрастают с увеличением диаметра. Однако при $D > L$ теплопроводность как функция D выходит на насыщение. В направлениях [110] и [111] теплопроводность с ростом D возрастает быстрее, чем в направлении [100], и анизотропия теплопроводности уменьшается. Когда диаметр образца совпадает с его длиной, то

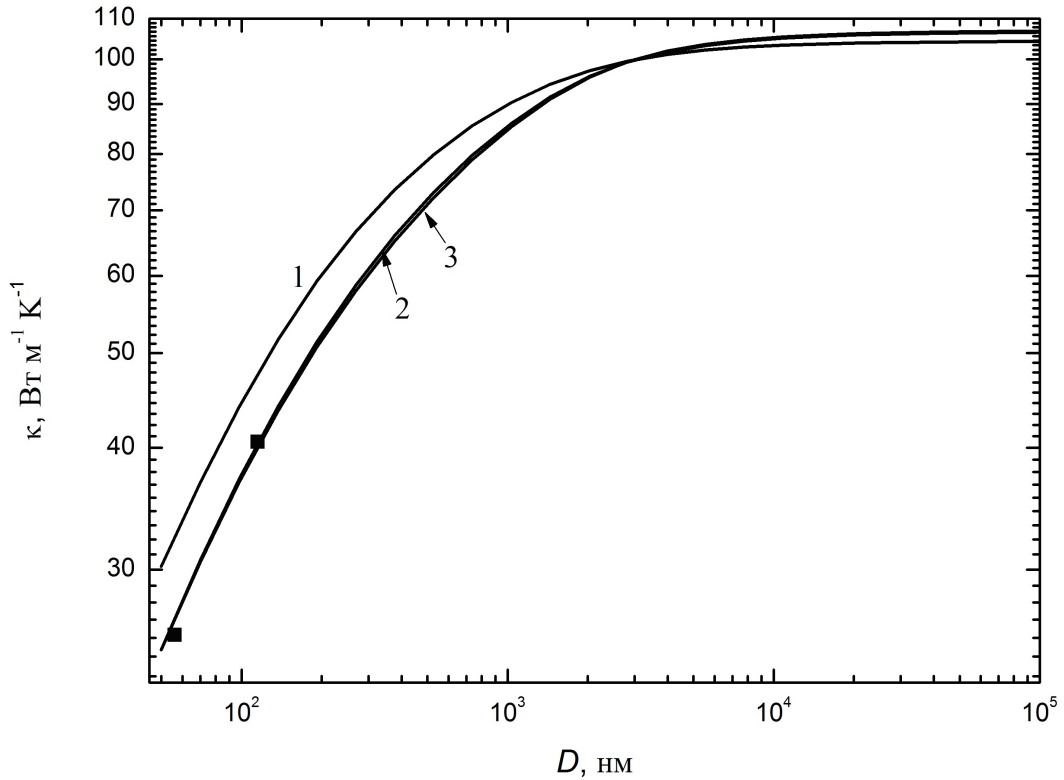


Рисунок 5.4. Зависимость теплопроводности нанопровода длины $L = 3$ мкм от его диаметра D при температуре 300 К. Кривая 1 – для направления [001], кривая 2 – для направления [101], кривая 3 – для направления [111]. Символы – экспериментальные данные [6].

кривые $\kappa_{[l]}(D)$ для симметричных направлений пересекаются, и анизотропия теплопроводности исчезает. При $D \ll L$ максимум теплопроводности имеет место для направления [001], и он обусловлен фокусировкой медленной поперечной моды. Для нанопровода с $D = 56$ нм отношение $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} = 1.20$. Однако при $D > L$ максимум теплопроводности переходит в направление [111], анизотропии теплопроводности уменьшается до 2%, и отношение $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} = 0.98$.

Рассмотрим и сравним температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым и квадратным сечениями. В разделе 3.2 отмечалось, что длины свободного пробега фононов для образцов бесконечной длины с круглым и квадратным сечениями при равенстве площадей поперечных сечений отличаются менее, чем на 1%. Поэтому представляет интерес рассчитать температурные зависимости теплопроводности нанопроводов с квадратным сечением и сравнить их с экспериментальными данными [6] и результатами, полученными в [11, 82] для нанопроводов с диаметрами 56 и 115 нм в интервале температур от 20 до 300 К. Мы полагаем, что сторона квадрата D и радиус нанопровода R определяется из условия $D = \sqrt{\pi}R$, а их длины совпадают. Параметр зеркальности отражения для нанопроводов взят одинаковым $P = 0.15$. Как видно из рисунка 5.5, результаты расчетов для нанопроводов квадратным и круглым сечениями [11, 82] хорошо согласуются друг с другом и с экспериментальными данными [6]: при $T = 20$ К отличие двух расчетов составляет 3.7%, а при $T = 300$ К - 0.6%, что значительно меньше погрешности эксперимента (5 – 10%). Причем, хорошо согласуются не только полные теплопроводности, но и вклады всех колебательных мод, а также дрейфового и диффузионного движения фононов (см. рис. 5.5). Эти результаты свидетельствуют, что аналитические реше-

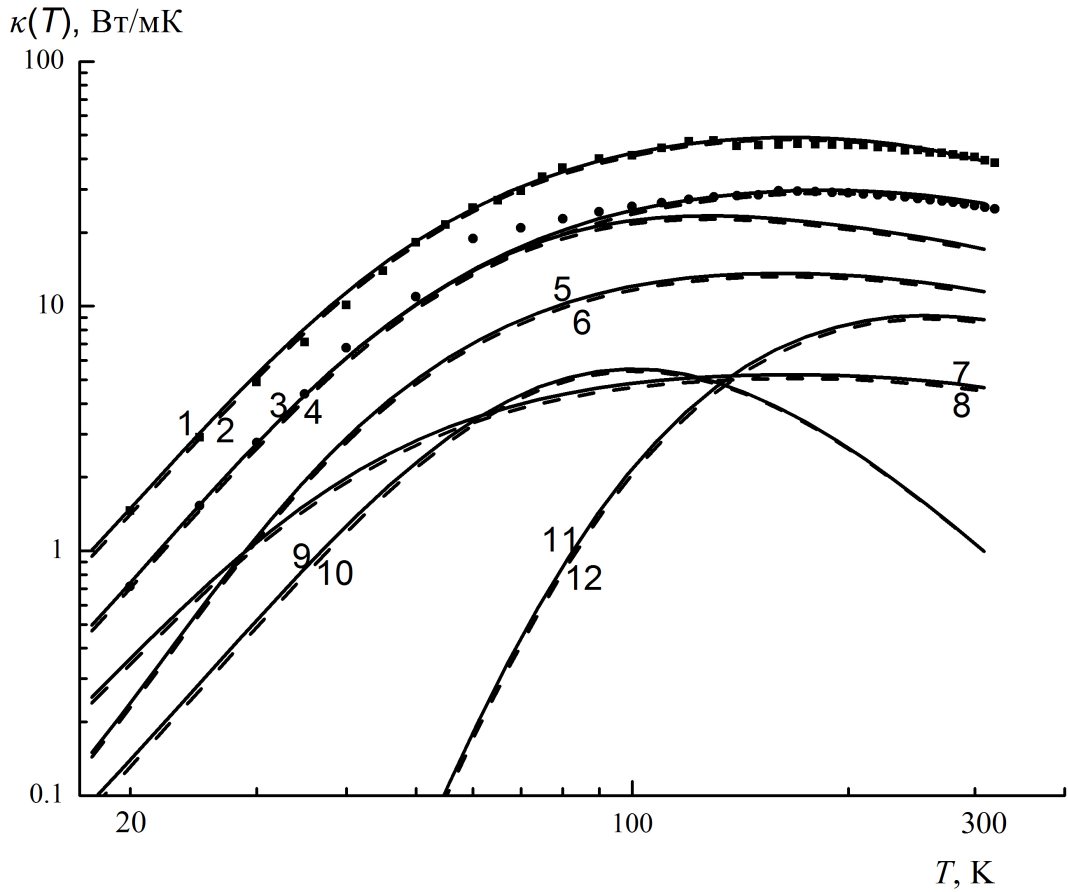


Рисунок 5.5. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с круглым (сплошные кривые 1,3) и квадратным (пунктирные кривые 2,4) поперечными сечениями, равными по площади ($D_n = \sqrt{\pi}R_n$) для $2R_1 = 115$ нм (кривые 1,2) и $2R_2 = 56$ нм (кривые 3,4), также вкладов в теплопроводность для нанопроводов с $D_2 = \sqrt{\pi}R_2$ и $2R_2 = 56$ нм: от быстрых поперечных фононов - кривые 5,6; медленных поперечных фононов - кривые 7, 8; диффузионного движения продольных фононов - кривые 9,10, дрейфового движения продольных фононов - кривые 11,12. Символы - экспериментальные данные [6].

ния для скоростей релаксации фононов при диффузном рассеянии на границах, полученные в главе 2, вполне адекватны реальной ситуации и могут быть использованы при интерпретации особенностей фононного транспорта в наноразмерных образцах различной геометрии.

5.1.2 Анизотропия теплопроводности кремниевых нанопроводов

Рассмотрим изменение анизотропии полной теплопроводности и вкладов в неё от различных ветвей фононного спектра при повышении температуры. Для этого проанализируем изменение угловых зависимостей теплопроводности с повышением температуры для нанопровода с $D = 115$ нм при вращении градиента температуры (оси образца) в диагональной плоскости куба $\{110\}$. В этом случае выражение для проекции групповой скорости фонона на направление градиента температур имеет вид (3.6):

$$V_{g3}^{\lambda} = (-V_{gx}^{\lambda} + V_{gy}^{\lambda}) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^{\lambda} \cos \psi.$$

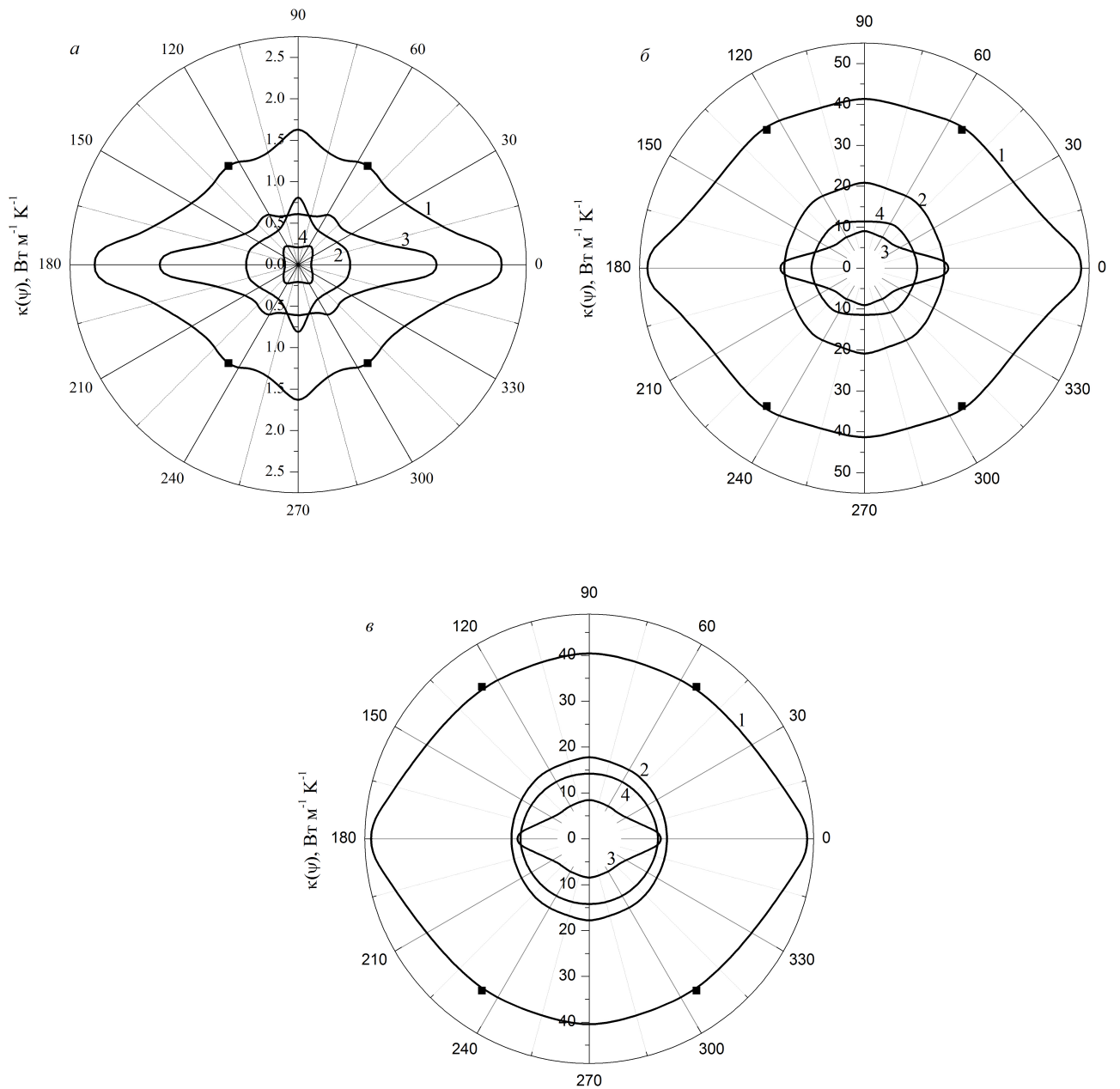


Рисунок 5.6. Угловые зависимости полной теплопроводности (Вт/мК) — кривая 1, и вкладов в нее от различных ветвей фононного спектра для нанопровода с $D = 115$ нм в случае вращения оси нанопровода в диагональной плоскости для температур: (а) — 20 К, (б) — 100 К, (в) — 300 К. Кривая 2 — вклад быстрой поперечной моды, кривая 3 — вклад медленной поперечной моды и кривая 4 — вклад продольной моды. Символы ■ — экспериментальные данные [6].

Это выражение определяет изменение времени релаксации фононов на границах при изменении направления теплового потока (ψ - угол между направлением потоком тепла и осью Z).

При $T = 20$ К доминирующий вклад в теплопроводность (49%) вносят медленные поперечные фононы. При этой температуре граничное рассеяние фононов обеспечивает 94% полного теплосопrotivления, поэтому его анизотропия максимальна. Максимальные значения теплопроводности реализуются в направлениях $[001]$ за счет фокусировки медленных поперечных фононов, а минимальные – при $\psi_{\min} \approx 68^\circ$ (см. рис. 5.6a). Максимальная анизотропия при этой температуре определяется отношением $\kappa_{[001]}/\kappa_{\min} = 1.79$. В направлениях $[011]$ и $[111]$ достигаются локальные максимумы за счет фокусировки быстрых поперечных и продольных фононов, соответственно (см. рис. 5.6a). Отношения величин теплопроводности для нанопровода с $D = 115$ нм в симметричных направлениях составляют $\kappa_{[001]} : \kappa_{[011]} : \kappa_{[111]} = 1.69 : 1.12 : 1$, однако, для нанопровода с $D = 56$ нм анизотропия оказывается несколько выше: $\kappa_{[001]} : \kappa_{[011]} : \kappa_{[111]} = 1.74 : 1.13 : 1$. Как видно из рисунков 5.6, анизотропия теплопроводности в кремниевых нанопроводах обеспечивается, главным образом, медленной поперечной модой, для которой отношение $\kappa_{[100]}^{t_2}/\kappa_{[110]}^{t_2}$ равно 2.70, 2.27 и 1.85 при температурах 20, 100 и 300 К, соответственно. Это позволяет считать, что уменьшение анизотропии теплопроводности с ростом температуры обусловлено главным образом уменьшением вклада медленной моды. При $T = 20$ К вклад быстрой поперечной моды $\kappa_{[100]}^{t_1}$ для направлений $[001]$ оказывается меньше вклада $\kappa_{[100]}^{t_2}$ в 2.7 раза, однако в направлениях $[011]$ он превышает вклад медленной моды в 1.3 раза и обеспечивает локальный максимум теплопроводности при $T = 20$ К. При повышении температуры вклад медленных поперечных фононов $\kappa_{[111]}^{t_2}(T)$ уменьшается с 49% при $T = 20$ К до 21% при $T = 100$ К. С другой стороны, вклады быстрых поперечных и продольных фононов в теплопроводность в этом направлении возрастают, достигая при $T = 100$ К соответственно 49 и 30%. При $T = 100$ К эти вклады становятся почти изотропными, поэтому анизотропия полной теплопроводности уменьшается до 26% (см. рис. 5.6б). Отношения величин теплопроводности для симметричных направлений при $T = 100$ К составляют $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} = 1.28 : 1.02 : 1$. Минимальные значения теплопроводности достигаются при $\psi_{\min} \approx 74^\circ$, они на 3% ниже, чем значения $\kappa_{[011]}$. При дальнейшем повышении температуры до $T = 300$ К вклад продольных фононов в теплопроводность для направлений $[111]$ возрастает до 36% за счет дрейфового движения фононов, тогда как вклады быстрых и медленных поперечных фононов в теплопроводность уменьшаются до 43% и 21%, соответственно. анизотропия полной теплопроводности при этом уменьшается. Отношение величин теплопроводности для нанопровода с $D = 115$ нм в симметричных направлениях при $T = 300$ К составляет $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} = 1.18 : 1 : 1$. Хотя при $T = 300$ К для нанопровода с $D = 115$ нм доминируют объемные механизмы релаксации ($T_{BV} = 265$ К), а для нанопровода с $D = 56$ нм доминирует граничное рассеяние ($T_{BV} = 353$ К), но на анизотропию теплопроводности это оказывает слабое влияние. Для нанопровода с $D = 56$ нм отношение значений теплопроводности в симметричных направлениях меняется незначительно $\kappa_{[001]} : \kappa_{[111]} : \kappa_{[011]} = 1.20 : 1 : 1$. Итак, проведенный анализ показал, что анизотропия теплопроводности в кремниевых нанопроводах обеспечивается, главным обра-

зом, медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении [100] и обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении.

5.2 Фононный транспорт в кремниевых пленках

В этом разделе проанализируем фононный транспорт в пленках, имеющих прямоугольное сечение, с толщиной D , шириной $W = \mu D$ и длиной L . Сравним с результатами экспериментальных работ [5,9,10], в которых исследовалась теплопроводность кремниевых пленок с толщинами $D = 1.6, 0.83, 0.42, 0.10$ и 0.02 мкм в интервале температур от 17 до 350 К. Теплопроводность кремниевых пленок с толщинами $D = 1.6, 0.83, 0.42$ мкм при низких температурах следовала зависимости $\kappa(T) \sim T^3$ [9, 10], как и теплоемкость объемных образцов в теории Дебая. Поэтому при расчете теплопроводности пленок (как и нанопроводов) мы использовали трехмерный спектр фононов. Для учета дисперсии тепловых фононов воспользуемся аппроксимационным спектром [27,40] (см. также Главу 1, раздел 1.2).

5.2.1 Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок

Для анализа теплопроводности пленок, как и нанопроводов, используется трехмодовая модель Каллавея [31–34]. Решеточная теплопроводность в этой модели выражается в виде аддитивной суммы диффузионного $\kappa_{dif}^{\{J\}}$ и дрейфового $\kappa_{dr}^{\{J\}}$ вкладов. В отличие от нанопроводов с круглым сечением теплопроводность пленок зависит не только от направления потока тепла $[I(\psi)]$, но и от ориентации плоскости пленки $\{J\}$ (см. Приложение А):

$$\begin{aligned} \kappa_{dif}^{\{J\}} &= \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 (z^{\lambda})^2 x^2}{\nu_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} \text{sh}^2(z^{\lambda}/2)} dx, \\ \kappa_{dr}^{\{J\}(1)} &= \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B_{[I(\psi)]}^{\{J\}(1)}(T) \Psi_{N[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

В полную скорость релаксации фононов $\nu_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}(q)$ дают вклад резистивные $\nu_{R[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}(q)$ и нормальные $\nu_N^{\lambda}(q)$ процессы релаксации фононов, последние обуславливают дрейфовый вклад в теплопроводность (см. Приложение А). В качестве резистивных процессов рассеяния учитывается рассеяние фононов на изотопическом беспорядке $\nu_{iso}^{\lambda}(q)$, границах образца $\nu_{B[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}(q)$ и в процессах фонон-фононного переброса $\nu_U^{\lambda}(q)$. Скорости релаксации фононов $\nu_{iso}^{\lambda}(q)$, $\nu_U^{\lambda}(q)$ и $\nu_N^{\lambda}(q)$ определены формулами (3.8) – (3.12).

Для пленок скорость релаксации фононов на границах $\nu_{B[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}(q)$ определяется кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами $k_0 = L/2D$ и $\mu = W/D$. При выполнении неравенств $\mu |V_{g1}^{\lambda}| > |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g1}^{\lambda}| \geq k_0$ или $\mu |V_{g1}^{\lambda}| < |V_{g2}^{\lambda}|$ и $|V_{g3}^{\lambda}/V_{g2}^{\lambda}| \geq$

k_0/μ скорости релаксации фононов на границах имеют вид (см. раздел 2.2):

$$\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) = \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \left\{ 1 - \frac{k_0 (|V_{g2}^\lambda| + \mu |V_{g1}^\lambda|)}{2 \mu |V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2 |V_{g1}^\lambda| |V_{g2}^\lambda|}{3 \mu (V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1}, \quad k_0 = \frac{L}{2D}. \quad (5.6)$$

Если $\mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| < k_0$ или $\mu |V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| < k_0/\mu$, то скорости релаксации определяются выражениями для образцов бесконечной длины

$$\begin{aligned} \nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) &= \frac{6}{D} \frac{\mu (V_{g1}^\lambda)^2}{(3\mu |V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|)}, \quad \text{если } \mu |V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|, \\ \nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) &= \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{(3 |V_{g2}^\lambda| - \mu |V_{g1}^\lambda|)}, \quad \text{если } |V_{g2}^\lambda| > \mu |V_{g1}^\lambda|. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Случай $\mu = 1$ соответствует нанопроводу с квадратным поперечным сечением. Компоненты групповой скорости (V_{g1}^λ , V_{g2}^λ , V_{g3}^λ) для различных ориентаций плоскости пленки $\{J\}$ и направлений потока тепла $[I]$ определены в Главе 3 формулами (3.5) - (3.7). Учет дисперсии фононов приводит к тому, что групповая скорость, а также скорости релаксации $\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$ в формулах (5.6) и (5.7) зависят не только от углов ψ , θ , φ , но и от приведенного волнового вектора фонона x .

В отличие от объемных кристаллов, для кремниевых тонких пленок, как и для нанопроводов, мы не можем обеспечить полностью диффузный характер рассеяния фононов на границах. Поэтому учтем частичную зеркальность отражения фононов от границ пленок стандартным образом [1, 15, 16, 35]

$$\tilde{\nu}_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(P, x, \theta, \varphi) = \frac{(1 - P)}{(1 + P)} \nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi), \quad (5.8)$$

где P - фактор зеркальности, который определяется из сопоставления результатов расчета теплопроводности с экспериментальными данными. Для кремниевых нанопроводов с круглым сечением в разделе 5.1 показано, что при учете фактора зеркальности $P = 0.15$ результаты расчета теплопроводности нанопроводов хорошо согласуются с экспериментальными данными [6] во всей температурной области. К сожалению, для пленок при изложении экспериментальных результатов в работах [5, 9, 10] не указывались направления теплового потока и ориентации плоскостей пленок относительно кристаллографических осей. Обычно в технологии «SOI» (кремний на изоляторе) пленки кремния выращивают с ориентациями $\{100\}$ или $\{111\}$ [84]. Нами показано, что для этих ориентаций в достаточно широких пленках ($L \gg D$ и $W \gg D$) теплопроводность в плоскости пленки практически не зависит от направления потока тепла (см. раздел 5.2.2). Однако ее зависимость от ориентации плоскости пленки является существенной: при переходе от ориентации $\{100\}$ к $\{111\}$ теплопроводность может увеличиваться более, чем в 2 раза. Поскольку информация об ориентации плоскостей пленок в [5, 9, 10] отсутствует, то мы рассчитали температурные зависимости теплопроводности для трех ориентаций $\{J\} = \{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ и согласовали результаты расчета с экспериментальными данными, воспользовавшись параметром P в качестве подгоночного. Результаты такой подгонки для пленок различной толщины приведены на рисунке 5.7. В пленках с $D = 1.6$ мкм и ориентацией $\{100\}$ значения теплопроводности хорошо согласуются с данными эксперимента [9, 10] при $P_{\{100\}} = 0.48$. Отметим, что

при $P = 0.48$ и $T = 20$ К для ориентаций $\{110\}$ и $\{111\}$ они оказываются соответственно на 7 и 21% меньше, чем для $\{100\}$, а отношения значений теплопроводности для них составляет $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}} = 1.21 : 1.13 : 1$. При значениях параметров $P_{\{110\}} = 0.51$ и $P_{\{111\}} = 0.56$ величины теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}}(T)$ и $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(T)$ также хорошо согласуются с экспериментальными данными и близки к значениям $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(T)$ при $P_{\{100\}} = 0.48$. Для пленок с $D = 0.83$ и 0.42 мкм с ориентацией $\{100\}$ результаты расчета согласуются с экспериментальными данными при $P_{\{100\}} = 0.29$. Однако для ориентаций $\{110\}$ и $\{111\}$ в этих пленках экспериментальные данные согласуются с результатами расчета при $P_{\{110\}} = 0.37$ и $P_{\{111\}} = 0.50$ (см. рис. 5.7). Отношения значения теплопроводности для пленок с $D = 0.42$ мкм при $P_{\{100\}} = 0.29$ и $T = 20$ К с различной ориентацией плоскости пленки составляют $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}} = 1.62 : 1.36 : 1$.

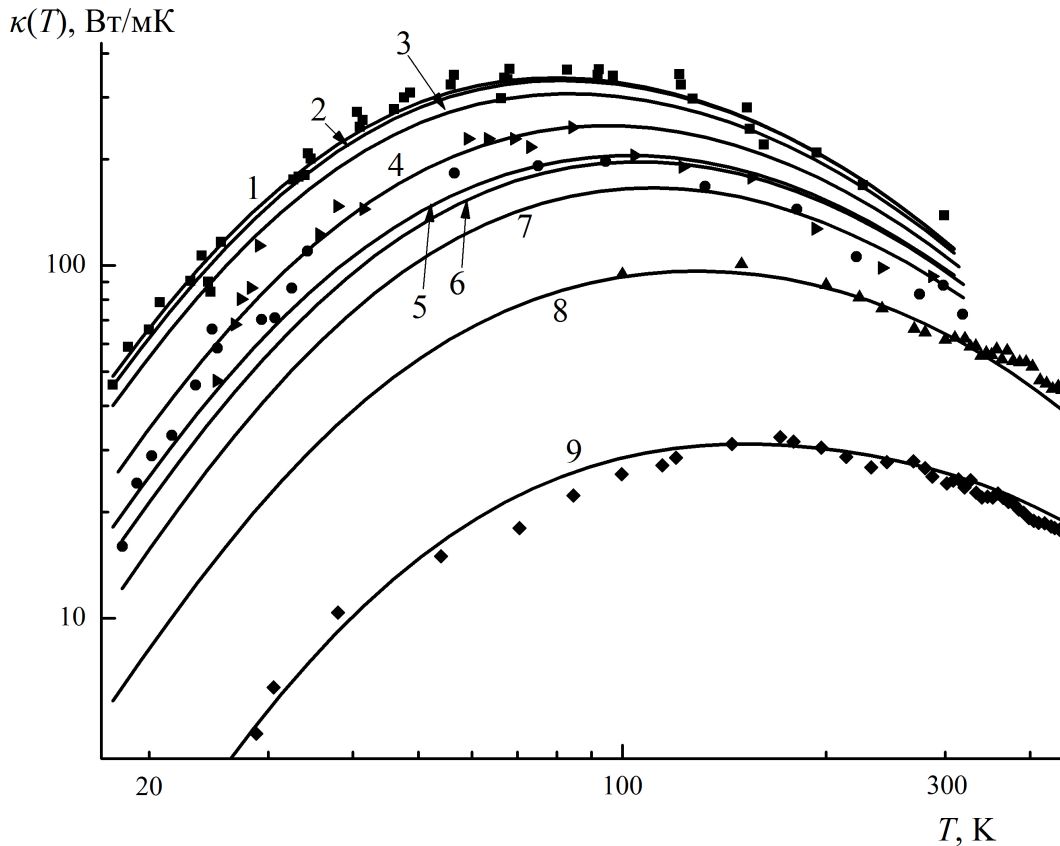


Рисунок 5.7. Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок для различных толщин D , параметров зеркальности P и длин пленок L : кривые 1,2,3 - $D = 1.6$ мкм, $P = 0.48$, $L = 8$ мкм; кривая 4 - $D = 0.83$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривые 5,6,7 - $D = 0.42$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривая 8 - $D = 0.10$ мкм, $P = 0.14$, $L = 100D$ и кривая 9 - $D = 0.02$ мкм, $P = 0$, $L = 100D$; для ориентаций плоскости пленки: $\{100\}$ — кривые 1,4,5,8,9; $\{110\}$ — кривые 2,6; $\{111\}$ — кривые 3,7. Ширина пленок $W = 100D$. Символы \blacksquare ($D = 1.6$ мкм), \blacktriangleright ($D = 0.83$ мкм), \bullet ($D = 0.42$ мкм), \blacktriangle ($D = 0.10$ мкм), \blacklozenge ($D = 0.02$ мкм) — экспериментальные данные [5, 9, 10].

Как видно из рисунка 5.7, результаты расчета теплопроводностей для нанопленок с $D = 100$ и 20 нм и ориентацией плоскости $\{100\}$ также удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [5]. Уменьшение толщины пленки приводит к возрастанию роли граничного рассеяния и, соответственно, к увеличению анизотропии теплопроводности. Отношения значения теплопроводности в пленках с $D = 100$ нм при $P_{\{100\}} = 0.14$ и температуры $T = 20$ К для

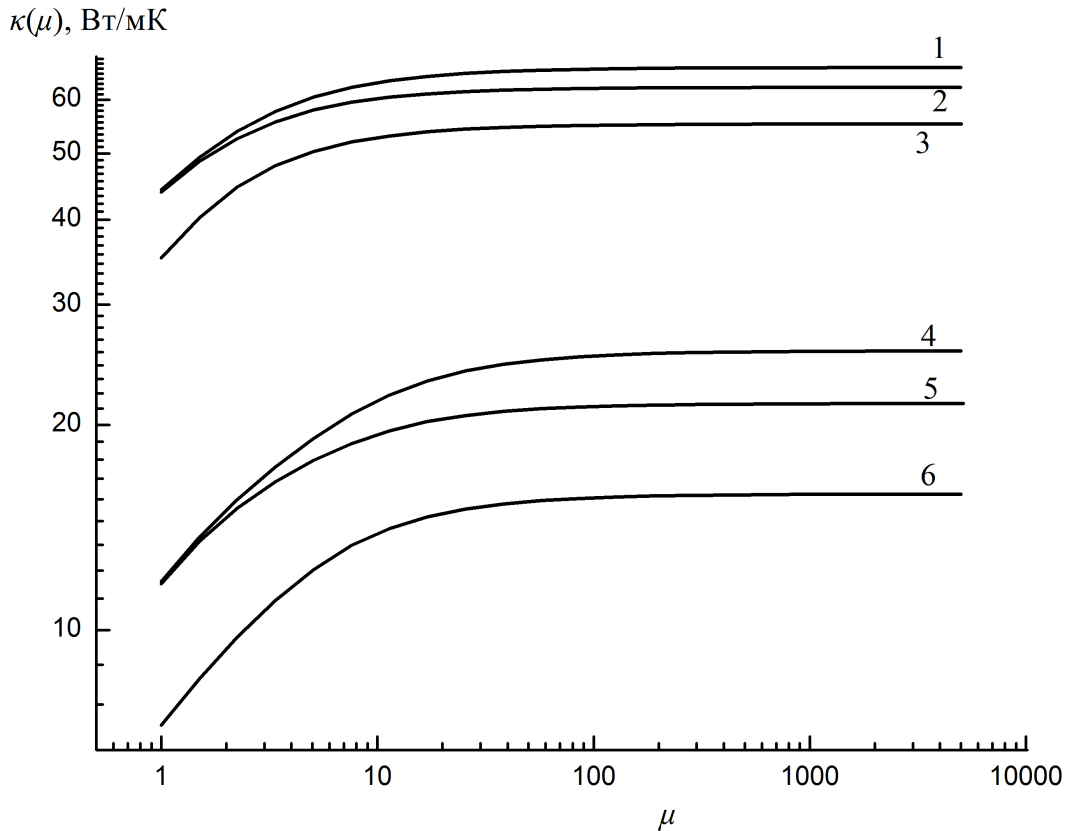


Рисунок 5.8. Зависимости теплопроводности кремниевых пленок от параметра μ при $L = 8$ мкм и толщинах пленки D : кривые 1,2,3 - 1.6 мкм, кривые 4,5,6 - 0.42 мкм; и ориентаций плоскости пленки $\{J\}$: кривые 1,4 – для $\{J\} = \{100\}$, кривые 2,5 – для $\{J\} = \{110\}$, кривые 3,6 – для $\{J\} = \{111\}$.

различных ориентаций плоскости пленки составляют $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}} : \kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}} = 2.17 : 1.53 : 1$. Для пленки с $D = 20$ нм параметр зеркальности P , по-видимому, близок к нулю – температурная зависимость теплопроводности для нее удовлетворительно описывается для значения $P = 0$. Итак, при диффузном рассеянии фононов на границах кремниевых пленок максимальной теплопроводностью обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью – плоскость с ориентацией $\{111\}$.

Анализ зависимости теплопроводности пленок от геометрических параметров показал, что при фиксированных величинах D и L увеличение ширины пленки приводит к возрастанию теплопроводности (см. рис. 5.8). При этом область её интенсивного роста ограничена значениями $\mu < 20(L/D)$ или $W < 20L$. При $\mu > 20(L/D)$ зависимости теплопроводности выходят на насыщение (см. рис. 5.8). При $\mu = 20(L/D)$ (например, для $D = 1.6$ мкм величина $\mu = 100$) теплопроводность всего лишь на 0.5% меньше предельного значения. Что касается зависимости теплопроводности от длины пленки, то при фиксированных величинах D и W , то область её интенсивного роста ограничена значениями $L < \mu D$. При длинах $L > 20\mu D$ она выходит на насыщение.

Следует отметить, что в значительном числе публикаций (см., например, [5, 9, 10, 41, 85, 86]) граничное рассеяние фононов в достаточно тонких пленках ($D \ll L$ и $D \ll W$) учитывалось аналогично тому, как это было сделано в работах Фукса [81] и Зондгеймера [80] при анализе про-

водимости тонких металлических пленок. При этом предполагалось, что длины свободного пробега и времена релаксации фононов в пленках зависят только от её толщины [5, 9, 10, 41, 85, 86]. В модели изотропной среды граничное рассеяние не приводило к анизотропии теплопроводности [5, 9, 10, 41]. Непосредственное обобщение результатов [80, 81] на упруго анизотропные кристаллы дает выражение для скорости релаксации на границах, которое зависит только от толщины D и компоненты групповой скорости V_{g1}^λ , перпендикулярной плоскости пленки [86]

$$\nu_B^\lambda(\theta, \varphi) = \left(\frac{1 - P}{1 + P} \right) \frac{V_{g1}^\lambda}{D}, \quad (5.9)$$

Способ определения фактора зеркальности P и его связь с шероховатостью поверхности не меняет суть проблемы [12, 15, 16, 80, 81, 85–87]. Учет граничного рассеяния в виде (5.9) приводит к некорректным результатам для зависимости теплопроводности от геометрических параметров и ориентаций плоскостей пленок. Согласно [5, 24, 77] теплопроводность пленок и длин пробега фононов существенно зависит от геометрических размеров. Более того, в [22, 24, 77, 78] показано, что длины Казимира в модели изотропной среды не только существенно зависят от ширины пленки, но и логарифмически расходятся при стремлении её ширины к бесконечности. Как отмечалось в [22, 77], эта расходимость обусловлена фононами, распространяющимися почти параллельно плоскости пленки. Как показано в [24, 78] (см. также раздел 4.2), учет конечной длины приводит к устранению этой расходимости.

Результаты, полученные в [86], для анизотропии теплопроводности также являются некорректными. Расчет температурных зависимостей теплопроводности кремниевых пленок в [86] с использованием выражения (5.9) показал, что её максимальные значения достигаются для ориентации $\{110\}$, а минимальные – для ориентации $\{100\}$ (см. [86], рис. 4а). Авторы делают вывод, что при диффузном рассеянии фононов на границах пленок наименьшей рассеивающей способностью (и максимальной теплопроводностью) обладает плоскость с ориентацией $\{110\}$, а максимальной рассеивающей способностью (и минимальной теплопроводностью) – плоскость с ориентацией $\{100\}$. Эти результаты являются ошибочными. Они противоречат экспериментальным данным [17] и результатам [24, 78]. В [17] показано, что в двух одинаковых образцах Si с прямоугольным сечением и градиентом температуры в направлении $[110]$ теплопроводность образца с широкой гранью $\{100\}$ оказалась на 33% выше, чем для образца с широкой гранью $\{110\}$. Этот результат диаметрально противоположен выводу, полученному в [86]. Следует отметить, что расчеты теплопроводности объемных образцов Si с использованием выражений (5.6) и (5.7) хорошо согласуются с экспериментальными данными [17]. Они количественно описывают зависимости теплопроводности Si, как от направления теплового потока, так и от ориентации боковых граней образцов [30]. Итак, при диффузном рассеянии на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$, а минимальной – плоскость с ориентацией $\{111\}$ (см. также [83]). Мы привели подробное обсуждение ориентационной зависимости теплопроводности, поскольку эта проблема играет важную роль в кремниевой микроэлектронике.

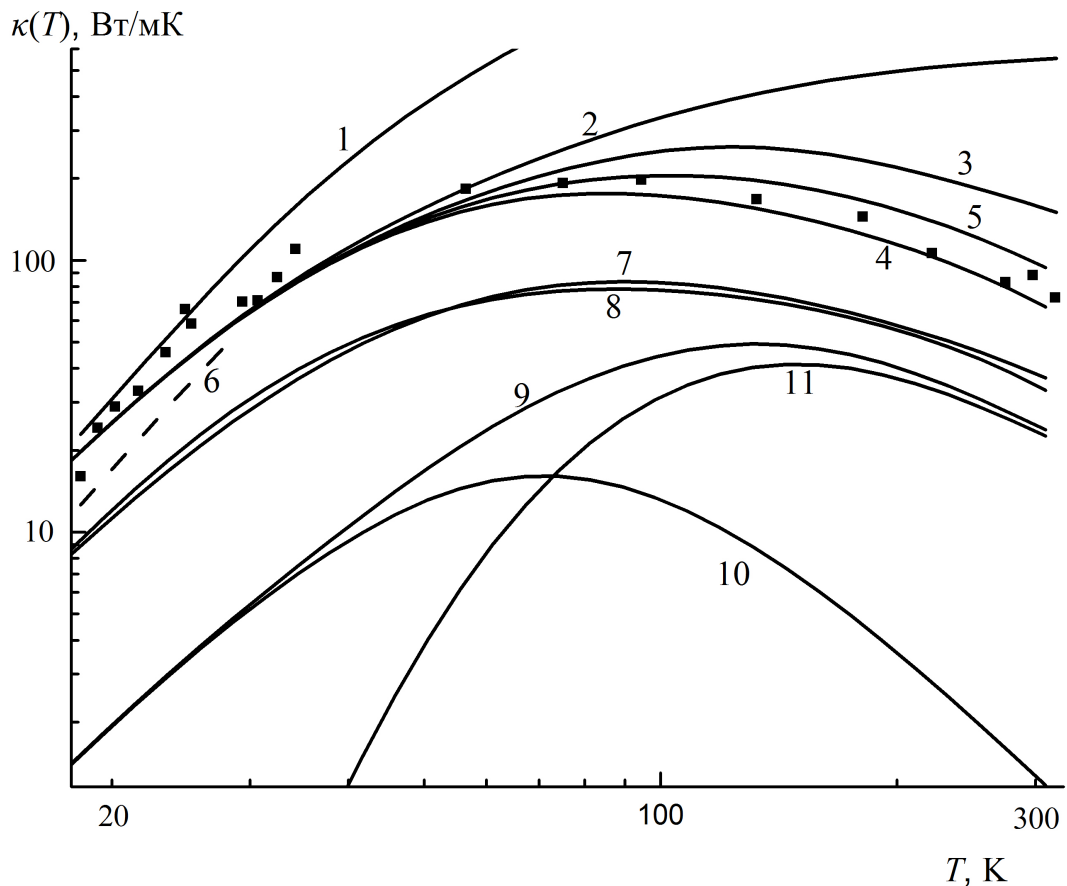


Рисунок 5.9. Температурные зависимости теплопроводности кремниевой пленки с $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм, $W = 100D$ и $P = 0.29$ для направления градиента температуры $[100]$ и ориентации пленки $\{100\}$ при включении различных механизмов рассеяния фононов: кривая 1 соответствует расчету теплопроводности в режиме граничного рассеяния, кривая 2 - учет граничного рассеяния и рассеяния на изотопическом беспорядке, кривая 3 - учет граничного рассеяния, рассеяния на изотопическом беспорядке и процессов переброса, кривая 4 – вклад диффузионного движения, кривая 5 – полная теплопроводность, кривая 6 - режим граничного рассеяния при $P = 0$. Кривая 7 – вклад быстрой поперечной моды, кривая 8 – вклад медленной поперечной моды, кривые 9 – суммарный вклад продольных фононов, кривая 10 – диффузионный вклад продольной моды, кривая 11 – вклад дрейфового движения продольных фононов. Символы ■ – экспериментальные данные [9, 10].

Для иллюстрации влияния различных механизмов релаксации на температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок в различных температурных интервалах на рисунке 5.8 приведены результаты расчета для пленки с $D = 0.42$ мкм. В низкотемпературной области основными механизмами релаксации фононов для пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм являются граничное и изотопическое рассеяние. В интервале температур от 17 до 40 К учет этих механизмов позволяет согласовать результаты расчета с экспериментальными данными [9, 10]. Вклады изотопического рассеяния при $T = 20$ К составляют 33 и 21% для пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм, соответственно. Отметим, что при диффузном рассеянии фононов на границах теоретические кривые для ориентации плоскостей пленок $\{100\}$ идут на 57 и 36% ниже экспериментальных данных для $D = 1.6$ и 0.42 мкм, соответственно (см. рис. 5.9, кривая 6). Далее при анализе температурных зависимостей теплопроводности пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм мы фиксируем ориентацию плос-

кости пленки $\{J\} = \{100\}$ и параметры зеркальности соответственно $P_{\{100\}} = 0.48$ и 0.29 . Как видно из рисунка 5.9, при температурах выше 50 К значительную роль в теплосопроотивлении играют ангармонические процессы рассеяния. При анализе теплопроводности кремниевых пленок мы используем те же самые параметры ангармонических процессов рассеяния, что и для нанопроводов (см. таблицу 5.1). С ростом температуры роль различных ветвей фононного спектра в теплопроводности пленок значительно изменяется. Эти изменения обусловлены главным образом дисперсией тепловых фононов, а также дрейфовым движением продольных фононов. Как видно из рисунка 5.9, при $T < 54$ К доминирующий вклад в теплопроводность вносит медленная поперечная мода (см. рис. 5.9, кривая 8). При $T = 20$ К ее вклад составляет 48%, а вклад быстрой моды – 42%. Наличие протяженных плоских участков в спектре медленной поперечной моды t_2 при $q_{\max}/2 < q < q_{\max}$ (см., раздел 1.2, рис. 1.4) приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к значительному уменьшению её вклада в теплопроводность с повышением температуры. В противоположность этому вклад быстрой поперечной моды t_1 с повышением температуры возрастает быстрее, и при $T > 54$ К он становится больше вклада моды t_2 (см. рис. 5.9, кривая 8). Поэтому во всем интервале температур от 54 до 350 К доминирующий вклад в теплопроводность вносит поперечная мода t_1 . Для поперечных фононов диффузионный вклад в теплопроводность во всем интервале температур значительно превосходит вклад дрейфового движения.

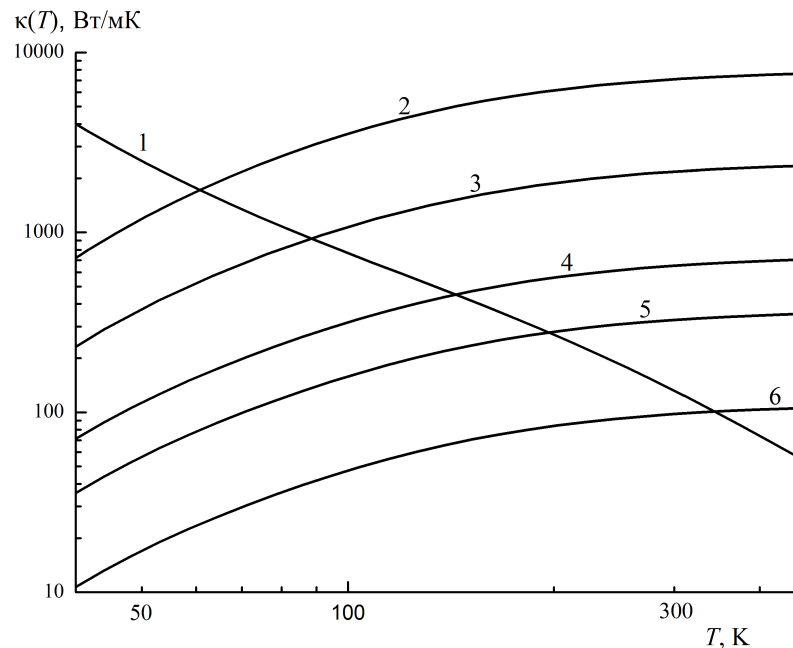


Рисунок 5.10. Температурные зависимости теплопроводности для пленок с ориентацией $\{100\}$ для объемных механизмов релаксации - кривая 1, и для граничного рассеяния в пленках с параметрами: $D = 1.6$ мкм, $L = 8$ мкм и $P = 0.48$ - кривая 2; $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм и $P = 0.29$ - кривая 3; $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ - кривая 4, $D = 0.05$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ - кривая 5 и $D = 0.02$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0$ - кривая 6.

Вклад продольных фононов в теплопроводность при $T = 20$ К мал - он составляет 10%. Однако с повышением температуры этот вклад быстро возрастает, главным образом, за счет дрейфового движения и при $T > 200$ К становится сравнимым с вкладом медленной поперечной

моды (см. рис. 5.9, кривая 11). При $T < 60$ К дрейфовый вклад в теплопроводность оказывается значительно меньше диффузионного. Однако в интервале температур от 100 до 300 К для продольных фононов доминируют нормальные процессы фонон-фононного рассеяния, и дрейфовый вклад в теплопроводность значительно превосходит диффузионный (см. рис. 5.9, кривые 10, 11). Вклады дрейфового движения фононов в полную теплопроводность пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм при $T = 100$ К составляют 15%, а при $T = 300$ К они достигают соответственно 26 и 28%. С уменьшением толщины пленки относительный вклад продольных фононов в теплопроводность возрастает. Однако для пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм он остается меньше вклада медленной поперечной моды. Как видно из рисунка 5.9, учет дрейфового движения продольных фононов позволяет согласовать результаты расчета теплопроводности пленок с экспериментальными данными [9, 10].

На рисунке 5.10 приведены температурные зависимости теплопроводности для пленок различной толщины, вычисленные в режиме граничного рассеяния фононов ($\nu = \nu_B$, кривые 2 - 6) и в режиме объемных механизмов релаксации фононов ($\nu_V = \nu_{iso} + \nu_U + \nu_N$, кривая 1). Пересечение этих кривых дает температуры перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации T_{BV} . При этой температуре вклады в теплосоппротивление, обусловленные граничным рассеянием и объемными механизмами, сравниваются и граничное рассеяние обеспечивает 50% полного теплосоппротивления. Численный анализ показал, что для кремниевых пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм температуры перехода T_{BV} составляют соответственно 61 и 89 К. Уменьшение толщины пленки и параметра зеркальности приводит к увеличению роли граничного рассеяния и к достаточно быстрому возрастанию температуры перехода T_{BV} . Так, например, уменьшение толщины пленки (при остальных фиксированных параметрах) до значений $D = 0.1$ и 0.05 мкм при $P = 0.14$ дает соответственно $T_{BV} = 143$ и 196 К, а для $D = 0.02$ мкм при $P = 0$ имеем $T_{BV} = 345$ К. При комнатных температурах вклады граничного рассеяния для пленок с $D = 1.6, 0.42, 0.1, 0.05$ и 0.02 мкм составляют соответственно 2, 6, 17, 29 и 58%. Итак, граничное рассеяние фононов играет существенную роль в теплопроводности достаточно тонких пленок при комнатных температурах.

5.2.2 Анизотропия теплопроводности кремниевых пленок

Проанализируем изменение анизотропии теплопроводности пленок различной ширины ($\mu = 1, 10$ и 100) с повышением температуры. Параметр зеркальности отражения возьмем $P = 0.14$, длина пленки считается фиксированной $L = 100D$, а толщина $D = 0.1$ мкм. Определим ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальную или минимальную теплопроводность в плоскости пленки. Для этого рассмотрим изменение угловых зависимостей теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T)$, когда тепловой поток вращается в плоскости пленки для трех случаев: (1) $\{J\} = \{100\}$, (2) $\{J\} = \{110\}$ и (3) $\{J\} = \{111\}$. В системе координат по осям образца компоненты групповой скорости фононов для рассматриваемых случаев могут

быть представлены в следующем виде (подробнее см. раздел 3.2, формулы (3.5) - (3.7))

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \quad V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \\
 (2) \quad & V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\
 & V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}, \\
 (3) \quad & V_{g3}^\lambda = (V_{gx}^\lambda - V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \cos \psi, \\
 & V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} (- (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / 2 + V_{gz}^\lambda) \sin \psi, \\
 & V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda + V_{gz}^\lambda) / \sqrt{3},
 \end{aligned}$$

где ψ - угол между потоком тепла и оси Z , направленной по ребру куба.

При $\mu = 1$ или $W = D$ мы имеем нанопровод с квадратным сечением. Поэтому развитая нами аналитическая теория дает нам уникальную возможность исследовать изменение рассчитанной анизотропии теплопроводности при переходе от нанопровода ($\mu = 1$) к достаточно широким пленкам ($\mu = 100$) при фиксированной температуре. На рисунке 5.11 приведены такие зависимости для двух температур 20 и 320 К и трех ориентаций плоскостей пленок $\{J\} = \{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$.

Рассмотрим сначала особенности фононного транспорта в кремниевых нанопроводах с квадратным сечением. Зависимость величин теплопроводности от ориентации боковых граней нанопровода мала. В случае, когда ось вращения и градиент температуры фиксированы и направлены вдоль $[111]$, то анизотропия теплопроводности, обусловленная изменением ориентаций боковых граней нанопровода составляет менее 0.1%. Для направления оси вращения и градиента температуры $[100]$ анизотропия теплопроводности не превышает 0.8%. В противоположность этому изменение направления теплового потока относительно осей кристалла приводит к значительной анизотропии теплопроводности. При вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$ максимум теплопроводности нанопроводов достигается в направлениях типа $[100]$, и обеспечивается медленной поперечной модой, которая фокусируется в этом направлении (см. рис. 5.11а,б). В направлениях $[110]$ и $[111]$ угловые зависимости теплопроводности имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной и продольной модами, соответственно (см. рис. 5.11в). При $T = 20$ К отношения значений теплопроводности для симметричных направлений составляют $\kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[110]}^{\{110\}} : \kappa_{[111]}^{\{110\}} = 1.72 : 1.14 : 1$. При комнатных температурах благодаря объёмным механизмам релаксации анизотропия теплопроводности значительно уменьшается: $\kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[110]}^{\{110\}} : \kappa_{[111]}^{\{110\}} = 1.10 : 1.01 : 1$. При вращении градиента температуры в плоскости $\{111\}$ угловые зависимости теплопроводности имеют локальные максимумы, которые обусловлены фокусировкой быстрой поперечной модой в направлениях типа $[110]$ (см. рис. 5.11д). Анизотропия теплопроводности в кремниевых нанопроводах с квадратным сечением обеспечивается, главным образом, медленной поперечной модой, для которой отношение $\kappa_{[100]}^{t_2\{110\}} / \kappa_{[110]}^{t_2\{110\}}$ равно 2.9, 2.2 и 1.8 при температурах соответственно 20, 100 и 320 К. Проведенный анализ показал, что для нанопроводов уменьшение анизотропии теплопроводности с ростом температуры обусловлено главным образом уменьшением вклада медленной поперечной

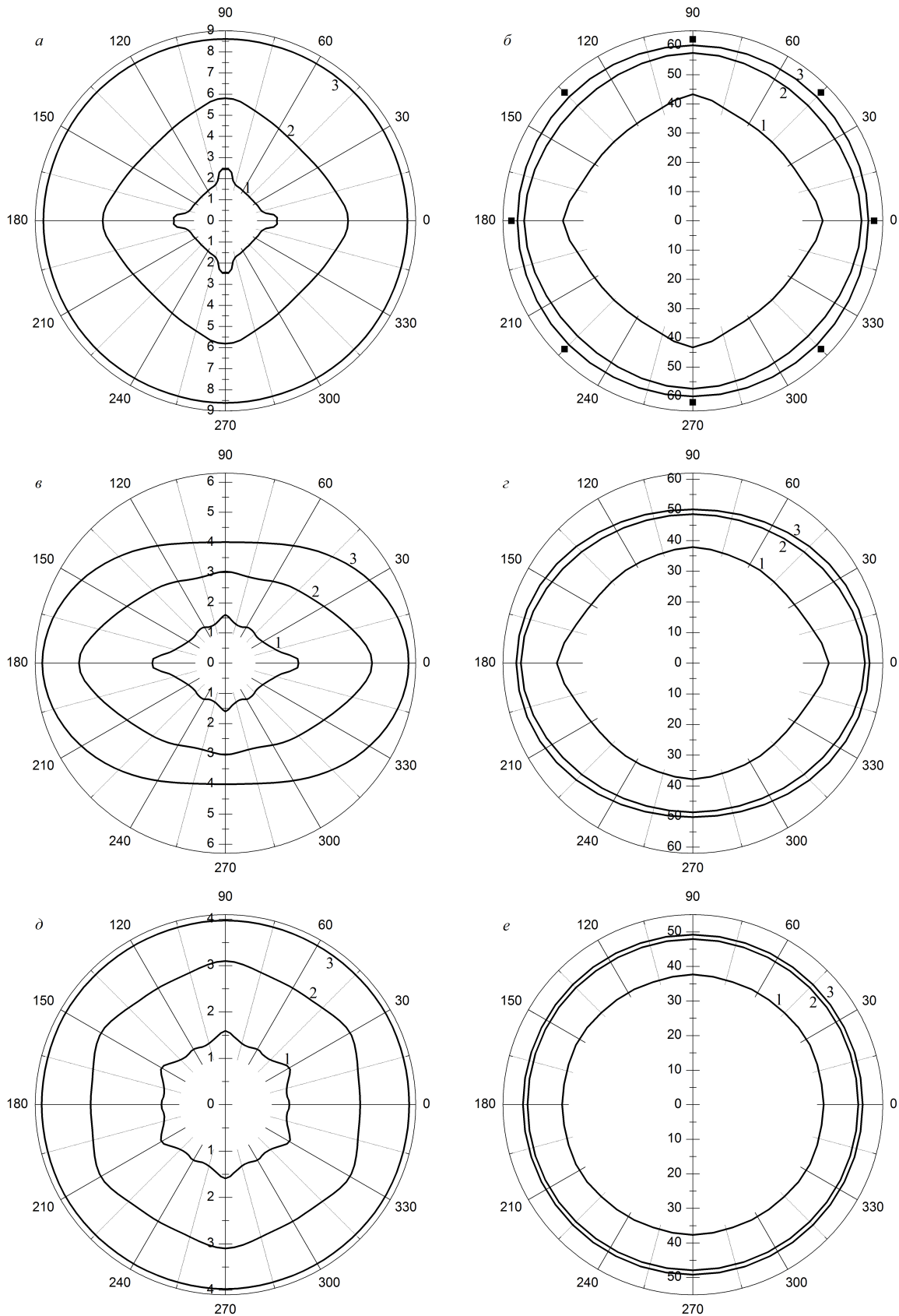


Рисунок 5.11. Угловые зависимости теплопроводности (Вт/мК) кремниевых пленок с $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ для двух температур 20 К (*a, в, д*) и 320 К (*б, з, е*) для трех ориентаций плоскостей пленок $\{J\} = \{100\}$ (*a, б*), $\{110\}$ (*в, з*) и $\{111\}$ (*д, е*), рассчитанные для трех значений параметра μ : кривые 1 - $\mu = 1$, кривые 2 - $\mu = 10$, кривые 3 - $\mu = 100$. Символы ■ – экспериментальные данные [5].

моды в полную теплопроводность (см. рис. 5.5, кривые 7,8). Вклад её при $T = 20$ К составляет 48%, тогда как при комнатной температуре - 18%.

Таблица 5.2. Отношения теплопроводностей кремниевых пленок и нанопроводов с квадратным сечением в симметричных направлениях для $D = 0.10$ мкм при температурах 20 и 320 К.

$T, \text{ К}$	μ	$\kappa_{[100]}^{\{100\}} / \kappa_{[110]}^{\{100\}}$	$\kappa_{[100]}^{\{110\}} / \kappa_{[110]}^{\{110\}}$	$\kappa_{[100]}^{\{110\}} / \kappa_{[111]}^{\{110\}}$	$\kappa_{[110]}^{\{100\}} / \kappa_{[110]}^{\{111\}}$
20	1	1.52	1.51	1.72	1.01
	10	1.19	1.60	1.50	1.58
	100	1.00	1.51	1.29	2.17
320	1	1.16	1.17	1.19	1.02
	10	1.01	1.16	1.12	1.16
	100	1.00	1.15	1.10	1.20

В противоположность нанопроводам, анизотропия теплопроводности в достаточно широких пленках связана, главным образом, с её зависимостью от ориентации плоскости пленки. Как видно из рисунков 5.11, угловые зависимости теплопроводности кремниевых пленок при вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ значительно отличаются, как друг от друга, так и от рассчитанных для нанопроводов. С ростом ширины пленок величины теплопроводности значительно увеличиваются по сравнению с нанопроводами. Так, например, при $T = 20$ К и изменении параметра μ от 1 до 100 приводит к возрастанию величин теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}}$ с плоскостью $\{100\}$ в направлениях $[100]$ и $[110]$ соответственно в 3.53 и 5.35 раза. Для плоскости $\{110\}$ величины теплопроводности $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{110\}}$ в направлениях $I = [100]$ и $[110]$ возрастают соответственно в 2.50 и 2.51 раза. Увеличение ширины пленки приводит к качественному изменению угловых зависимостей теплопроводности по сравнению с нанопроводами: зависимость теплопроводности от направления потока тепла ослабляется. для пленок с плоскостями $\{100\}$ и $\{111\}$ при $\mu = 100$ она становится почти изотропной, хотя при $\mu = 10$ небольшая анизотропия еще остается (см. рис. 5.11а, б, д, е): при $T = 20$ К для наноструктур с $\mu = 1, 10$ и 100 отношения $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu) / \kappa_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ оказываются равными соответственно 1.52, 1.19 и 1.00 (см. Таблицу 5.2). Следует отметить, что максимальные значения теплопроводности достигаются для ориентации $\{100\}$, а минимальные – для ориентации $\{111\}$ (см. рис. 5.11). Для достаточно широких пленок Si ($\mu = 100$) при $T = 20$ К и $P = 0.14$ отношение теплопроводностей $\kappa_{[I(\psi)]}^{\{100\}}(100) / \kappa_{[I(\psi)]}^{\{111\}}(100)$ для этих ориентаций составляет 2.17 (см. Таблицу 5.2). С увеличением температуры возрастает роль объемных механизмов рассеяния и анизотропия теплопроводности уменьшается, так например, для наноструктур с $\mu = 1$ и 10 отношение $\kappa_{[100]}^{\{100\}}(\mu) / \kappa_{[110]}^{\{100\}}(\mu)$ при $T = 320$ К уменьшается до значений соответственно 1.16 и 1.01 (см. Таблицу 5.2). С увеличением температуры ослабляется также анизотропия, связанная с зависимостью теплопроводности от ориентации плоскости пленки. Если при $T = 20$ К и $\mu = 100$ отношение теплопроводностей для ориентаций $\{100\}$ и $\{111\}$ равно 2.17, то при $T = 320$ К оно уменьшается до 1.20 (см. Таблицу 5.2). При этом вклад граничного рассеяния в теплосопrotивление нанопленки с $D = 0.1$ мкм при комнатной

температуре составляет 17%. Для плоскости $\{110\}$ угловые зависимости $\kappa_{[T(\psi)]}^{\{110\}}(\mu)$ в достаточно широких пленках принимают эллипсоидальный вид с длинной осью вдоль направления $[100]$. Для этой ориентации при $T = 20$ К и $\mu = 1, 10, 100$ отношение значений теплопроводности $\kappa_{[100]}^{\{110\}}(\mu)/\kappa_{[110]}^{\{110\}}(\mu)$ составляет 1.51, 1.60 и 1.51, а при $T = 320$ К оно уменьшается до значений соответственно 1.17, 1.16 и 1.15 (см. Таблицу 5.2).

Итак, показано, что угловые зависимости теплопроводности качественно изменяется при переходе от нанопроводов с квадратным сечением к достаточно широким пленкам. Во-вторых, при диффузном рассеянии на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью - пленки с ориентацией $\{111\}$.

5.3 Выводы

Основные выводы пятой главы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Показано, что температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов диаметром более 50 нм и пленок толщиной более 20 нм могут быть адекватно описаны в рамках трехмодовой модели Каллавея с использованием трехмерного спектра фононов.
2. Использование вычисленных нами времен релаксации фононов на границах наноразмерных образцов, а также параметров ангармонического рассеяния позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кремниевых нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм и пленок с толщинами 1.6, 0.83, 0.42, 0.10 и 0.02 мкм во всем температурном интервале вплоть до 350 К.
3. Исследование вкладов граничного рассеяния и объемных механизмов релаксации в теплосопротивление показало, что переход от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации для нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм происходит при температурах соответственно 265 и 353 К, а для пленок толщиной 1.6, 0.42, 0.10 и 0.02 мкм – при температурах соответственно 61, 89, 143 и 345 К. При комнатных температурах вклад граничного рассеяния в теплосопротивление достигает 40 и 60% для нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм и 17 и 58% для пленок с толщинами 0.1 и 0.02 мкм, соответственно.
4. Показано, что анизотропия теплопроводности нанопроводов определяется фокусировкой и дефокусировкой фононов, тогда как для тонких пленок она в значительной степени определяется рассеивающей способностью плоскости пленки.
5. Показано, что дисперсия тепловых фононов оказывает значительное влияние на теплопроводность кремниевых нанопроводов и тонких пленок. Наличие протяженных плоских участков в спектре медленных поперечных коротковолновых фононов приводит к аномально низким значениям групповой скорости и, соответственно, к значительному уменьшению их вклада в теплопроводность с ростом температуры.
6. Определены оптимальные ориентации плоскостей пленок и направления потока тепла, обеспечивающие максимальный или минимальный теплоотвод от кремниевых пленок как

при низких, так и при комнатных температурах. Показано, что при диффузном рассеянии фононов на границах пленок Si максимальной теплопроводностью обладают пленки с ориентацией $\{100\}$, а минимальной теплопроводностью - пленки с ориентацией $\{111\}$.

Заключение

В диссертационной работе исследовано влияние фокусировки фононов, анизотропии упругих свойств и дисперсии тепловых фононов на анизотропию и температурные зависимости теплопроводности объемных и наноразмерных материалов на основе кубических кристаллов. Разработан метод учета фокусировки фононов при расчете теплопроводности монокристаллических образцов и описаны имеющиеся экспериментальные данные по теплопроводности кремниевых образцов. Проанализированы особенности фононного транспорта в монокристаллических тонких пленках и нанопроводах, обусловленные фокусировкой фононов. Изучены зависимости теплопроводности и длин пробега фононов для ряда наиболее актуальных полупроводников от геометрических параметров, от направлений теплового потока и ориентаций боковых граней наноразмерных образцов.

Основные выводы диссертационной работы можно отразить в следующих пунктах:

1. Дано полное аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Показано, что при низких температурах для образцов с квадратным и круглым сечениями длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превосходят длины пробега фононов остальных колебательных мод.
2. Использование развитого метода учета фокусировки фононов и вычисленных нами времен релаксации фононов для диффузного рассеяния на границах образцов позволяет адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности объемных образцов кремния с квадратным и прямоугольным сечениями для различных направлений градиента температуры и ориентаций боковых граней образцов во всем исследованном интервале температур.
3. Показано, что анизотропия теплопроводности в нанопроводах определяется фокусировкой и дефокусировкой фононов, тогда как для тонких пленок она в значительной степени определяется ориентацией плоскости пленки, имеющих различную симметрию. Причем, в кристаллах с положительной анизотропией модулей упругости второго порядка (LiF, GaAs, Ge, Si и YAG) для получения максимальных значений теплопроводности необходимо использовать пленки с плоскостью $\{100\}$, а для получения минимальных значений - пленки с плоскостью $\{111\}$. Максимальные значения теплопроводности в пленках на основе кристаллов с отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка (CaF₂, NaCl,

YIG) достигаются для ориентации плоскости $\{110\}$ и направления теплового потока $[110]$, а минимальные - для ориентации плоскости пленки $\{100\}$.

4. Использование полученных времен релаксации фононов на границах образца и аппроксимационного спектра тепловых фононов позволило в трехмодовой модели Каллавея адекватно описать температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов с диаметрами 115 и 56 нм и кремниевых пленок с толщинами 1.6, 0.83, 0.42, 0.10 и 0.02 мкм во всем температурном интервале вплоть до 350 К.
5. Показано, что при комнатных температурах существенную роль в теплосоппротивлении наноразмерного образца играет рассеяние фононов на границах: его вклад достигает 60% для кремниевого нанопровода с диаметром 56 нм и 58% для кремниевой пленки с толщиной 20 нм.

Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации работы кремниевых микросхем, а также при создании новых полупроводниковых устройств.

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю Кулеву Игорю Гайнитдиновичу за постановку научных задач и помощь в решении возникающих вопросов на всех этапах выполнения работы, соавторам: Кулеву Ивану Игоревичу, Инюшкину Александру Васильевичу и Устинову Владимиру Васильевичу за плодотворную работу, всяческое содействие и ценные рекомендации. Автор благодарит весь коллектив сотрудников лаборатории кинетических явлений, в особенности: Танкеева Анатолия Петровича и заведующего лабораторией Михалева Константина Николаевича за разностороннюю помощь и чуткое отношение.

Приложение А

Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и решеточная теплопроводность кубических кристаллов

В рамках стандартного релаксационного метода [1, 35, 36] решеточную теплопроводность кубических кристаллов в трехмодовой модели Каллавея [31–34] можно представить в виде аддитивной суммы диффузионного и дрейфового вкладов. Получим выражения для этих вкладов. Для простоты у частот релаксаций фононов опустим индексы, указывающие на направление потока тепла $[I]$ и ориентацию широкой грани образца $\{J\}$.

Система кинетических уравнений для неравновесных функций распределения N_q^λ с учетом нормальных процессов рассеяния имеет вид [1, 31–36]:

$$\mathbf{V}_g^\lambda(q) \cdot \nabla_r N_q^\lambda = -(N_q^\lambda - N_q^{(0)\lambda})\nu_R^\lambda - (N_q^\lambda - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}^\lambda))\nu_N^\lambda. \quad (A.1)$$

Здесь $\nu_N^\lambda(q)$ и $\nu_R^\lambda(q)$ - скорости релаксации фононов в нормальных (N-процессах) и резистивных процессах рассеяния. N-процессы стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение [1, 31–36], которое описывается смещенной функцией Планка

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}^\lambda) = \left(\exp \left(\frac{\hbar\omega_q^\lambda - \hbar\mathbf{q}\mathbf{u}^\lambda}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-1} \cong N_q^{(0)\lambda} + \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{u}^\lambda}{k_B T} N_q^{(0)\lambda} (N_q^{(0)\lambda} + 1), \quad (A.2)$$

где $N_q^{(0)\lambda}$ - функция Планка. В этом случае система фононов описывается девятью параметрами: частотами релаксации $\nu_N^\lambda(q)$ и $\nu_R^\lambda(q)$ и средними скоростями дрейфа фононов \mathbf{u}^λ для каждой ветви фононного спектра. Учет особой роли N-процессов необходим, когда частота релаксации $\nu_N^\lambda(q)$ будет больше, чем $\nu_R^\lambda(q)$ [34].

Представим функцию распределения фононов в виде суммы функции Планка и неравновесной добавки $g^\lambda(\mathbf{q})$, для которой получим

$$g^\lambda(\mathbf{q}) = -\frac{N_q^{(0)\lambda}(N_q^{(0)\lambda} + 1)}{\nu^\lambda(q)} \frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T^2} (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r T) + \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{u}^\lambda}{k_B T} N_q^{(0)\lambda} (N_q^{(0)\lambda} + 1) \frac{\nu_N^\lambda(q)}{\nu^\lambda(q)} = g_{dif}^\lambda(\mathbf{q}) + g_{dr}^\lambda(\mathbf{q}). \quad (A.3)$$

Первое и второе слагаемые в (А.3) определяются диффузией и дрейфом фононов. Скорости дрейфа \mathbf{u}^λ находятся из уравнения баланса импульса фононов [31, 32, 34]

$$\frac{1}{V} \sum_{q,\lambda} \hbar \mathbf{q} \nu_N^\lambda(q) \frac{N_q^{(0)\lambda} (N_q^{(0)\lambda} + 1)}{k_B T \nu^\lambda(q)} \left[\frac{\hbar \omega^\lambda}{T} (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r T) + \hbar \mathbf{q} \mathbf{u}^\lambda \nu_R^\lambda(q) \right] = 0. \quad (\text{A.4})$$

Если в N-процессах доминируют механизмы релаксации с участием фононов различных поляризаций, то они стремятся установить одинаковую скорость дрейфа для всех фононов. Тогда скорость дрейфа $\mathbf{u}^{(1)}$ не зависит от поляризации. К первому типу относятся механизмы релаксации Херринга [37] и Ландау-Румера [38], а также ряд других процессов. В механизме Херринга [37] слияние продольного фонона с медленным поперечным фононом (ST) порождает быстрый фонон (FT):

$$\nu_N^L \cong B_{LTT} T^3 (\omega^L)^2. \quad (\text{A.5})$$

Согласно [1, 35, 36] основным механизмом релаксации поперечных фононов в N-процессах рассеяния является механизм Ландау-Румера [38], в котором слияние поперечного и продольного фононов порождает продольный фонон ($T_1 + L_2 \rightarrow L_3$):

$$\nu_N^t \cong B_{TLL} T^4 \omega^t. \quad (\text{A.6})$$

Для второго типа N-процессов ($L_1 + L_2 \rightarrow L_3$, $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$) импульс фононов перераспределяется внутри каждой колебательной ветви, поэтому скорости дрейфа будут различными для фононов различных поляризаций $\mathbf{u}^{L(2)} \neq \mathbf{u}^{t(2)}$. Саймонсом [88, 89] показано, что процессы второго типа в изотропных средах могут происходить только при учете затухания фононных состояний, причем, в них могут принимать участие только коллинеарные фононы. Однако в работах [52, 53] показано, что учет кубической анизотропии приводит к выполнению закона сохранения энергии в механизмах релаксации TTT , и эти механизмы в длинноволновом приближении вносят значительно больший вклад в релаксацию поперечных фононов, чем механизм Ландау-Румера. Для механизма TTT скорость релаксации ν_N^t определяется также выражением типа (А.6), но с коэффициентом B_{TTT}^N вместо B_{TLL}^N . В первом варианте N-процессов скорость дрейфа не зависит от поляризации фононов, а во втором случае закон сохранения импульса выполняется для каждой из ветвей фононного спектра.

Заметим, что в изотропном случае направления групповой и фазовой скорости совпадают, поэтому диффузионное и дрейфовое слагаемые в функции $g^\lambda(\mathbf{q})$ могут быть объединены и введена эффективная частота релаксации фононов [31, 32]. При учете анизотропии спектра фононов эти направления не совпадают. Прямой расчет $g^\lambda(\mathbf{q})$ и скоростей дрейфа $\mathbf{u}^{(1,2)}$ для обоих вариантов дает:

$$\begin{aligned} g^{\lambda(1,2)}(\mathbf{q}) &= -k_B \frac{N_q^{(0)\lambda} (N_q^{(0)\lambda} + 1)}{k_B T \nu^\lambda(q)} \left(\frac{\hbar \omega^\lambda}{k_B T} \right) \left\{ (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r T) + \left(\left(\frac{\mathbf{q}}{q} \right) \nabla_r T \right) \frac{\nu_N^\lambda(q)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))} B^{(1,2)}(T) \right\} = \\ &= g_{dif}^\lambda(\mathbf{q}) + g_{dr}^\lambda(\mathbf{q}), \\ \mathbf{u}^{(1,2)} &= -k_B \nabla_r T B^{(1,2)}(T) / k_B T. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

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

$$B^{(1)}(T) = \sum_{\lambda} \Psi_N^{\lambda} / \sum_{\lambda} \Psi_{NR}^{\lambda}, \quad B^{(2)}(T) = \Psi_N^{\lambda} / \Psi_{NR}^{\lambda}, \quad (A.8)$$

$$\Psi_N^{\lambda} = 3 \int_{-1}^1 \cos \theta d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^4 \int_0^1 \frac{V_{gz}^{\lambda} z^{\lambda} x^3}{\text{sh}^2(z^{\lambda}/2)} \frac{\nu_N^{\lambda}}{\nu^{\lambda}} dx,$$

$$\Psi_{NR}^{\lambda} = \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^5 \int_0^1 \frac{x^4}{\text{sh}^2(z^{\lambda}/2)} \frac{\nu_N^{\lambda} \nu_R^{\lambda}}{\nu^{\lambda}} dx,$$

$$x = \frac{q}{q_{\max}(\theta, \varphi)}, \quad y(T, \theta, \varphi) = \frac{q_{\max}(\theta, \varphi)}{q_T}, \quad q_T = \frac{k_B T}{\hbar}, \quad z^{\lambda}(x, \theta, \varphi) = \frac{\hbar \omega_q^{\lambda}(x, \theta, \varphi)}{k_B T}.$$

Максимальный волновой вектор $q_{\max}(\theta, \varphi)$ определен выражением (1.18) (см. также работу [27]). При вычислении теплопроводности нанопроводов и нанопленок дисперсия тепловых фононов учитывается аналогично работе [27].

Итак, в трехмодовой модели Каллавея теплопроводность состоит из диффузионного и дрейфового вкладов:

$$\kappa^{(1,2)} = \kappa_{dif} + \kappa_{dr}^{(1,2)}. \quad (A.9)$$

Если направить градиент температуры по оси стержня, то выражение для решеточной теплопроводности можно представить в виде:

$$\kappa_{dif} = \frac{k_B q_T^3}{4(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi y^3 \int_0^1 \frac{(V_{g3}^{\lambda})^2 (z^{\lambda})^2 x^2}{\nu^{\lambda} \text{sh}^2(z^{\lambda}/2)} dx,$$

$$\kappa_{dr}^{(1,2)} = \frac{k_B q_T^3}{12(2\pi)^3} \sum_{\lambda} B^{(1,2)}(T) \Psi_N^{\lambda}. \quad (A.10)$$

Список работ автора

- A1. Кулеев, И. Г. Влияние дисперсии и затухания состояний тепловых фононов на поглощение продольного ультразвука в кристаллах Ge / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, № 8. – С. 1564-1575.
- A2. Времена релаксации и длины свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния для монокристаллов кремния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, № 1. – С. 24-35.
- A3. Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллов кремния в режиме граничного рассеяния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, № 7. – С. 1441-1450.
- A4. Features of phonon transport in silicon rods and thin plates in the boundary scattering regime. The effect of phonon focusing at low temperatures / I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev, S.M. Bakharev, A.V. Inyushkin // Physica B: Condens. Matter. – 2013. – V. 416. – P. 81 - 87.
- A5. Кулеев, И. Г. Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2014. – Т. 145, № 2. – С. 292-305.
- A6. Кулеев, И. И. Анизотропия теплопроводности монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2014. – Т. 146, № 3. – С. 525-539.
- A7. Effect of phonon focusing on the temperature dependence of thermal conductivity of silicon / I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev, S.M. Bakharev, A.V. Inyushkin // physica status solidi (b). – 2014. – V. 251, № 5. – P. 991 - 1000.
- A8. Кулеев, И. Г. Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78, № 9. – С. 1147-1149.
- A9. Kuleyev, I. I. Phonon focusing and features of phonon transport in silicon nanofilms and nanowires at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev // physica status solidi (b). – 2015. – V. 252, № 2. – P. 323 - 332.

- A10. Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2015. – Т. 147, № 4. – С. 736-749.
- A11. Кулеев, И. Г. Влияние дисперсии и анизотропии спектра на поглощение продольного ультразвука в кристаллах Ge / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С. М. Бахарев // XII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов, 14-20 ноября 2011 г. – Екатеринбург, 2011. – С. 140.
- A12. Кулеев, И. Г. Поглощение продольного ультразвука в кристаллах германия. Роль дисперсии и анизотропии спектра тепловых фононов / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С. М. Бахарев // XXXIV Международная зимняя школа физиков-теоретиков "Коуровка-XXXIV": Тезисы докладов, 26 февраля – 3 марта 2012 г. – Новоуральск, 2012. – С. 87.
- A13. Фокусировка фононов и фононный транспорт в кристаллах кремния в режиме граничного рассеяния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // XXXVI Сессия по физике низких температур НТ-36: Тезисы докладов, 2 – 6 июля 2012 г. – Санкт-Петербург, 2012. – С. 63–64.
- A14. Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллах кремния в режиме граничного рассеяния / И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // XXXVI Сессия по физике низких температур НТ-36: Тезисы докладов, 2 – 6 июля 2012 г. – Санкт-Петербург, 2012. – С. 76–77.
- A15. Анизотропия длин свободного пробега фононов в кристаллах кремния при низких температурах. Роль фокусировки фононов / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // XIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов, 7 – 14 ноября 2012 г. – Екатеринбург, 2012. – С. 99.
- A16. Кулеев, И. И. Фононный транспорт в кремниевых нанопленках и нанопроводах при низких температурах. Роль фокусировки фононов / И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев // VI Международная научная конференция "Актуальные проблемы физики твердого тела"(ФТТ-2013): Тезисы докладов, 15–18 октября 2013 г. – Беларусь, Минск, 2013. – Т. 2. - С. 293.
- A17. Кулеев, И. Г. Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев. // XIV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов, 20 – 26 ноября 2013 г. – Екатеринбург, 2013. – С. 106.
- A18. Кулеев, И. И. Фокусировка фононов и особенности фононного транспорта в объемных и наноструктурированных полупроводниковых кристаллах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев // Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2013 года: Тезисы докладов, 31 марта – 4 апреля 2014 г. Екатеринбург, 2014. С. 58 – 59.

- A19. Бахарев, С. М. Влияние упругой анизотропии на теплопроводность монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах / С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев // XV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества: Тезисы докладов, 13 – 20 ноября 2014 г. – Екатеринбург, 2014. – С. 229.
- A20. Влияние фокусировки фононов на теплопроводность кремниевых пленок / И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, И. Г. Кулеев, В. В. Устинов // XXXVII Сопещания по физике низких температур НТ-37: Тезисы докладов, 29 июня – 3 июля 2015 г. – Казань, 2015. – С. 58–59.

Литература

1. Берман, Р. Теплопроводность твёрдых тел / Р. Берман. — Мир, 1979. — С. 286.
2. Драбл, Дж. Теплопроводность полупроводников / Дж. Драбл, Г. Голдсмит. — Москва : Издательство иностранной литературы, 1963. — С. 266.
3. Harrison, J. Thermal Conductivity of Cerium Magnesium Nitrate / J. Harrison, J. Pendry // *Phys. Rev. B*. — 1973. — Apr. — V. 7. — P. 3902–3906.
4. McConnell, A. D. Nanoscale thermal transport / A. D. McConnell, K. E. Goodson // *Annual Review on Heat Transfer*. — 2005. — V. 14. — P. 129–168.
5. Liu, W. Phonon–boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers / W. Liu, M. Asheghi // *Applied Physics Letters*. — 2004. — V. 84, № 19. — P. 3819–3821.
6. Thermal conductivity of individual silicon nanowires / Deyu Li, Yiying Wu, Philip Kim et al. // *Applied Physics Letters*. — 2003. — V. 83, № 14. — P. 2934–2936.
7. Nanoscale thermal transport / D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson et al. // *J. Appl. Phys.* — 2003. — V. 93, № 2. — P. 793–818.
8. Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012 / D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen et al. // *Applied Physics Reviews*. — 2014. — V. 1, № 1. — P. 011305.
9. Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates / M. Asheghi, M. N. Touzelbaev, K. E. Goodson et al. // *Journal of Heat Transfer*. — 1998. — V. 120, № 1. — P. 30–36.
10. Phonon-boundary scattering in thin silicon layers / M. Asheghi, Y. K. Leung, S. S. Wong, K. E. Goodson // *Applied Physics Letters*. — 1997. — V. 71, № 13. — P. 1798–1800.
11. Кулеев, И. Г. Анизотропия и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // *Известия РАН. Серия физическая*. — 2014. — Т. 78, № 9. — С. 1147–1149.
12. Ziman, J. M. Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids / J. M. Ziman. — Oxford : Oxford University Press, 1962.

13. *Knudsen, Martin*. Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren / Martin Knudsen // *Annalen der Physik*. — 1909. — V. 333, № 1. — P. 75–130.
14. *Casimir, H. B. G.* Note on the conduction of heat in crystals / H. B. G. Casimir // *Physica*. — 1938. — V. 5. — P. 495–500.
15. *Berman, R.* The Thermal Conductivity of Diamond at Low Temperatures / R. Berman, F. E. Simon, J. M. Ziman // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 1953. — V. 220, № 1141. — P. 171–183.
16. *Berman, R.* Thermal Conduction in Artificial Sapphire Crystals at Low Temperatures. I. Nearly Perfect Crystals / R. Berman, E. L. Foster, J. M. Ziman // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 1955. — V. 231, № 1184. — P. 130–144.
17. *McCurdy, A. K.* Anisotropic Heat Conduction in Cubic Crystals in the Boundary Scattering Regime / A. K. McCurdy, H. J. Maris, C. Elbaum // *Phys. Rev. B*. — 1970. — Nov. — V. 2. — P. 4077–4083.
18. *Wybourne, M N.* Phonon boundary scattering at a silicon-sapphire interface / M N Wybourne, C G Eddison, M J Kelly // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. — 1984. — V. 17, № 23. — P. L607.
19. *Wang, Zhao.* Absence of Casimir regime in two-dimensional nanoribbon phonon conduction / Zhao Wang, Natalio Mingo // *Applied Physics Letters*. — 2011. — V. 99, № 10. — P. 101903.
20. *Wolfe, J. P.* Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids / J. P. Wolfe. — New York : Cambridge University Press, 1998.
21. *Mingo, N.* Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations / N. Mingo // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Sep. — V. 68. — P. 113308.
22. *Maris, H. J.* Heat flow in nanostructures in the Casimir regime / H. J. Maris, S. Tamura // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Feb. — V. 85. — P. 054304.
23. Thermal conductivity of diamond nanowires from first principles / Wu Li, Natalio Mingo, L. Lindsay et al. // *Phys. Rev. B*. — 2012. — May. — V. 85. — P. 195436.
24. *Кулеев, И. И.* Анизотропия теплопроводности монокристаллических нанопленок и нанопроводов при низких температурах / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. — 2014. — Т. 146, № 3. — С. 525–539.
25. *Кулеев, И. Г.* Упругие волны в кубических кристаллах с положительной и отрицательной анизотропией модулей упругости второго порядка / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев // *Физика твердого тела*. — 2007. — Т. 49, № 3. — С. 422–429.

26. Geometry and temperature dependent thermal conductivity of diamond nanowires: A non-equilibrium molecular dynamics study / J. Guo, B. Wen, R. Melnik et al. // *Physica E*. — 2010. — Nov. — V. 43. — P. 155–160.
27. Влияние дисперсии на фокусировку фононов и анизотропию теплопроводности монокристаллов кремния в режиме граничного рассеяния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // *Физика твердого тела*. — 2013. — Т. 55, № 7. — С. 1441–1450.
28. Времена релаксации и длины свободного пробега фононов в режиме граничного рассеяния для монокристаллов кремния / И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин // *Физика твердого тела*. — 2013. — Т. 55, № 1. — С. 24–35.
29. Features of phonon transport in silicon rods and thin plates in the boundary scattering regime. The effect of phonon focusing at low temperatures / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, A. V. Inyushkin // *Physica B: Condens. Matter*. — 2013. — V. 416, № 0. — P. 81–87.
30. Effect of phonon focusing on the temperature dependence of thermal conductivity of silicon / I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, A. V. Inyushkin // *physica status solidi (b)*. — 2014. — V. 251, № 5. — P. 991–1000.
31. Кулеев, И. Г. Влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на максимальные величины теплопроводности изотопически чистых кристаллов кремния / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. — 2002. — Т. 122, № 3. — С. 558–569.
32. Кулеев, И. Г. Нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и теплопроводность кристаллов германия с изотопическим беспорядком / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. — 2001. — Т. 120, № 3. — С. 649–660.
33. Krumhansl, J. A. Thermal conductivity of insulating crystals in the presence of normal processes / J. A. Krumhansl // *Proc. Phys. Soc.* — 1965. — V. 85, № 5. — P. 921–930.
34. Callaway, Joseph. Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures / Joseph Callaway // *Phys. Rev.* — 1959. — Feb. — V. 113. — P. 1046–1051.
35. Могилевский, Б. М. Теплопроводность полупроводников / Б. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский. — Москва : Наука, 1972. — С. 536.
36. Гуревич, В.Л. Кинетика фононных систем / В.Л. Гуревич. — Москва : Наука, 1980. — С. 400.
37. Herring, C. Role of Low-Energy Phonons in Thermal Conduction / C. Herring // *Phys. Rev.* — 1954. — Aug. — V. 95. — P. 954–965.
38. Landau, L. Absorption of sound in solids / L. Landau, G. Rumer // *Phys. Z. Sowjetunion*. — 1937. — V. 11. — P. 18–25.

39. Федоров, Ф. И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф. И. Федоров. — Москва : Наука, 1965. — С. 388.
40. Кулеев, И. Г. Влияние дисперсии и затухания состояний тепловых фононов на поглощение продольного ультразвука в кристаллах Ge / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // *Физика твердого тела*. — 2011. — Т. 53, № 8. — С. 1564–1575.
41. Zhu, Y.F. Re-examination of Casimir limit for phonon traveling in semiconductor nanostructures / Y.F. Zhu, J.S. Lian, Q. Jiang // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — March. — V. 92. — P. 113101.
42. Акустические кристаллы / А. А. Блистанов, В. С. Бондаренко, Н. В. Переломова и др. — Москва : Наука, 1982. — С. 632.
43. Yogurtcu, Y K. Elastic behaviour of YAG under pressure / Y K Yogurtcu, A J Miller, G A Saunders // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. — 1980. — V. 13, № 36. — P. 6585.
44. Truell, R. Ultrasonic Methods in Solid State Physics / R. Truell, C. Elbaum, B. B. Chick. — New York and London : Academic Press, 1969. — P. 464.
45. Overton, W. C. The Adiabatic Elastic Constants of Rock Salt / W. C. Overton, R. T. Swim // *Phys. Rev.* — 1951. — Nov. — V. 84. — P. 758–762.
46. McSkimin, H. J. Elastic Moduli of Diamond / H. J. McSkimin, W. L. Bond // *Phys. Rev.* — 1957. — Jan. — V. 105. — P. 116–121.
47. McSkimin, H. J. Elastic Moduli of Silicon vs Hydrostatic Pressure at 25.0 C and 195.8 C / H. J. McSkimin, P. Andreatch // *Journal of Applied Physics*. — 1964. — V. 35, № 7. — P. 2161–2165.
48. Huffman, D. R. Specific Heat and Elastic Constants of Calcium Fluoride at Low Temperatures / D. R. Huffman, M. H. Norwood // *Phys. Rev.* — 1960. — Feb. — V. 117. — P. 709–711.
49. Galt, J. K. Mechanical Properties of NaCl, KBr, KCl / J. K. Galt // *Phys. Rev.* — 1948. — Jun. — V. 73. — P. 1460–1462.
50. Drabble, J.R. Third order elastic constants of gallium arsenide / J.R. Drabble, A.J. Brammer // *Solid State Communications*. — 1966. — V. 4, № 9. — P. 467 – 468.
51. Briscoe, C. V. Elastic Constants of LiF from 4.2 K to 300 K by Ultrasonic Methods / C. V. Briscoe, C. F. Squire // *Phys. Rev.* — 1957. — Jun. — V. 106. — P. 1175–1177.
52. Kuleyev, I. G. Interaction of collinear and noncollinear phonons in anharmonic scattering processes and their role in ultrasound absorption of fast quasi-transverse modes in cubic crystals / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Yu. Arapova // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 2010. — V. 22, № 9. — P. 095403.

53. Kuleyev, I. G. Anharmonic processes of scattering and absorption of slow quasi-transverse modes in cubic crystals with positive and negative anisotropies of second-order elastic moduli / I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Yu. Arapova // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2008. — V. 20, № 46. — P. 465201.
54. Taylor, B. Focusing of Phonons in Crystalline Solids due to Elastic Anisotropy / B. Taylor, H. J. Maris, C. Elbaum // *Phys. Rev. B.* — 1971. — Feb. — V. 3. — P. 1462–1472.
55. Taylor, B. Phonon Focusing in Solids / B. Taylor, H. J. Maris, C. Elbaum // *Phys. Rev. Lett.* — 1969. — Aug. — V. 23. — P. 416–419.
56. Simons, S. The absorption of very high frequency sound in dielectric solids / S. Simons // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society.* — 1957. — 7. — V. 53. — P. 702–716.
57. Herring, C. Theory of the Thermoelectric Power of Semiconductors / C. Herring // *Phys. Rev.* — 1954. — Dec. — V. 96. — P. 1163–1187.
58. Nilsson, G. Study of the Homology between Silicon and Germanium by Thermal-Neutron Spectrometry / G. Nilsson, G. Nelin // *Phys. Rev. B.* — 1972. — Nov. — V. 6. — P. 3777–3786.
59. Bilz, H. Phonon dispersion relations in insulators / H. Bilz, W. Kress. — New York : Springer Ser. in Solid-State Sci.10, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, 1979. — P. 241.
60. Теплоемкость высокочистого кремния / Г.Г. Девярых, А.В Гусев, А.М Гибин, О.В. Тимофеев // *Неорганические материалы.* — 1997. — Т. 33, № 12. — С. 1425–1428.
61. Flubacher, P. The heat capacity of pure silicon and germanium and properties of their vibrational frequency spectra / P. Flubacher, A. J. Leadbetter, J. A. Morrison // *Philosophical Magazine.* — 1959. — V. 4, № 39. — P. 273–294.
62. Лейбфрид, Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов / Г. Лейбфрид. — Москва : Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. — С. 312.
63. Такер, Дж. Гиперзвук в физике твердого тела / Дж. Такер, В. Рэмpton. — Москва : Мир, 1975. — С. 272.
64. Maris, H. J. Enhancement of Heat Pulses in Crystals due to Elastic Anisotropy / H. J. Maris // *J. Acoust. Soc. Am.* — 1971. — V. 50. — P. 812–818.
65. Held, E. Imaging of crystal defects with ballistic phonons and their three-dimensional reconstruction using digital image processing / E. Held, W. Klein, R.P. Huebener // *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter.* — 1989. — V. 75, № 2. — P. 223–234.

66. *Jasiukiewicz, Cz.* Phonon focussing patterns: Calculation of response of finite area detectors to pulsed ballistic beams of dispersive and dispersionless phonons / *Cz. Jasiukiewicz, T. Paszkiewicz, D. Lehmann // Zeitschrift Zur Physik B Condensed Matter.* — 1994. — V. 96, № 2. — P. 213–222.
67. *Carruthers, Peter.* Theory of Thermal Conductivity of Solids at Low Temperatures / *Peter Carruthers // Rev. Mod. Phys.* — 1961. — Jan. — V. 33. — P. 92–138.
68. *Joshi, Y. P.* Effect of phonon focussing on thermal conductivity of silicon / *Y. P. Joshi // Pramana.* — 1982. — June. — V. 18. — P. 461–472.
69. Subsurface damage of abraded silicon wafers / *H. Lundt, M. Kerstan, A. Huber, P. O. Hahn // Proc. of 7th Int. Symp. on silicon materials science and technology / The Electrochemical Society, Pennington, N. J.* — 1994. — P. 218.
70. *Tamura, S.* Lattice dynamics and elastic phonon scattering in silicon / *S. Tamura, J. A. Shields, J. P. Wolfe // Phys. Rev. B.* — 1991. — Aug. — V. 44. — P. 3001–3011.
71. *Tamura, Shin-ichiro.* Isotope scattering of dispersive phonons in Ge / *Shin-ichiro Tamura // Phys. Rev. B.* — 1983. — Jan. — V. 27. — P. 858–866.
72. *Kuleyev, I. G.* Quasi-transverse ultrasound absorption due to point defects and anharmonic scattering processes in cubic crystals with positive and negative anisotropies of the second-order elastic moduli / *I. G. Kuleyev, I. I. Kuleyev, I. Yu. Arapova // J. Phys.: Condens. Matter.* — 2007. — V. 19, № 40. — P. 406216.
73. *Srivastava, G. P.* The Physics of Phonons / *G. P. Srivastava.* — Bristol : Adam Hilger, 1990.
74. Predicting the Thermal Conductivity of Si and Ge Nanowires / *Natalio Mingo, Liu Yang, Deyu Li, Arun Majumdar // Nano Letters.* — 2003. — V. 3, № 12. — P. 1713–1716.
75. *Holland, M. G.* Analysis of Lattice Thermal Conductivity / *M. G. Holland // Phys. Rev.* — 1963. — Dec. — V. 132. — P. 2461–2471.
76. *Жернов, А. П.* Влияние композиции изотопов на фоновые моды. Статические атомные смещения в кристаллах / *А. П. Жернов, А. В. Инюшкин // Успехи физических наук.* — 2001. — Т. 171, № 8. — С. 827–854.
77. *Zaitlin, M. P.* Boundary scattering of phonons in noncrystalline materials / *M. P. Zaitlin, L. M. Scherr, A. C. Anderson // Phys. Rev. B.* — 1975. — Nov. — V. 12. — P. 4487–4492.
78. *Kuleyev, I. I.* Phonon focusing and features of phonon transport in silicon nanofilms and nanowires at low temperatures / *I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev // physica status solidi (b).* — 2015. — V. 252, № 2. — P. 323–332.
79. *Smoluchowski, M.* Zur kinetischen Theorie der Transpiration und Diffusion verdünnter Gase / *M. Smoluchowski // Annalen der Physik.* — 1910. — V. 338, № 16. — P. 1559–1570.

80. *Sondheimer, E.H.* The mean free path of electrons in metals / E.H. Sondheimer // *Advances in Physics*. — 1952. — V. 1, № 1. — P. 1–42.
81. *Fuchs, K.* The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals / K. Fuchs // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. — 1938. — 1. — V. 34. — P. 100–108.
82. *Кулеев, И. Г.* Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопроводов / И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. — 2014. — Т. 145, № 2. — С. 292–305.
83. Фокусировка фононов и температурные зависимости теплопроводности кремниевых нанопленок / И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, И.Г. Кулеев, В.В. Устинов // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. — 2015. — Т. 147, № 4. — С. 736–749.
84. *O'Mara, W.* Handbook of Semiconductor Silicon Technology / W. O'Mara, R. B. Herring, Hunt L. P. — 1 edition. — William Andrew, 1990. — P. 795.
85. *Turney, J. E.* In-plane phonon transport in thin films / J. E. Turney, A. J. H. McGaughey, C. H. Amon // *Journal of Applied Physics*. — 2010. — V. 107, № 2. — P. 024317.
86. *Aksamija, Z.* Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes / Z. Aksamija, I. Knezevic // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Jul. — V. 82. — P. 045319.
87. *Soffer, Stephen B.* Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction / Stephen B. Soffer // *Journal of Applied Physics*. — 1967. — V. 38, № 4. — P. 1710–1715.
88. *Simons, S.* On the Mutual Interaction of Parallel Phonons / S. Simons // *Proceedings of the Physical Society*. — 1963. — V. 82, № 3. — P. 401.
89. *Simons, S.* On the interaction of long wavelength phonons with thermal phonons / S. Simons // *Proceedings of the Physical Society*. — 1964. — V. 83, № 5. — P. 749.